

ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE

---

ÚSTAV MECHANIKY, BIOMECHANIKY A  
MECHATRONIKY



# DIPLOMOVÁ PRÁCE

Studie distribuce teploty analyzátoru  
biologických vzorků

Bc. David Vaclík  
Praha 2018

---

Prohlašuji, že svou diplomovou práci na téma „Studie distribuce teploty analyzátoru biologických vzorků“ jsem vypracoval samostatně pod vedením vedoucího diplomové práce a s použitím odborné literatury a dalších informačních zdrojů, které jsou všechny citovány v práci a uvedeny v seznamu literatury na konci práce. Nemám závažný důvod proti užití tohoto školního díla ve smyslu § 60 zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon).

David Vaclík (V Praze dne 8.6.2018)

---

**Jméno autora(Author):** Bc. David Vaclík

**Vedoucí práce(Thesis supervisor):** Ing. Petr Tichý, Ph.D.

**Název diplomové práce(Title):** Studie distribuce teploty analyzátoru biologických vzorků (Heat Transfer Study of a Biological Sample Analyzer)

**Univerzita (University):** České vysoké učení technické v Praze (Czech Technical University in Prague)

**Fakulta(Faculty):** Fakulta strojní (Faculty of Mechanical Engineering)

**Ústav(Department):** 12105 Ústav mechaniky, biomechaniky a mechatroniky (Department of Mechanics, Biomechanics and Mechatronics)

**Počet stran(Number of pages):** 80

**Počet obrázků(Number of figures):** 36

**Počet tabulek(Number of tables):** 13

**Přílohy(Extras):**

**Abstrakt:** Tato diplomová práce se zabývá popisem a návrhem držáku biologických vzorků, kde cílem je popis distribuce teplot uvnitř regionu vzorku v závislosti na čase a zvoleném referenčním bodě pro umístění tepelného čidla. Samotné řešení je provedeno pomocí ko-simulace metodou konečných prvků kde dochází k interakci s chladičím proudem suchého vzduchu (CFD). Samotná práce je pak doplněna o stručný popis spektrofotometrie a vlivu teploty na analýzu biologických vzorků.

**Abstract:** This thesis is focused on design and description of a Biological Sample Analyzer, where the main goal is to describe a thermal field distribution inside of the specified biological sample with dependance on time and chosen reference point for insertion of a thermal probe. The problem itself is solved by finite-element method co-simulation with interaction from cooling stream of dry air (CFD). Part of the thesis is also a brief description of spectrophotometry method and the effect of temperature of a biological sample analysis.

**Klíčová slova:** distribuce teploty, spektrofotometrická analýza, vliv teploty na stabilitu, chlazení proudem suchého vzduchu, CFD ko-simulace, návrh analyzátoru biologických vzorků

**Key words:** distribution of temperature, spectrophotometry analysis, effect of temperature on stability, cooling by a stream of dry air, CFD co-simulation, design of a biological sample analysis analyzer

---

## Poděkování

V úvodu bych rád poděkoval vedoucímu diplomové práce, Ing. Petru Tichému, Ph.D., za odbornou pomoc, připomínky a návrhy během všech částí práce. Také bych rád poděkoval svým rodičům za podporu během studia.

# Obsah

<b>Anotační list</b>	<b>iv</b>
<b>Poděkování</b>	<b>v</b>
<b>Nomenclature</b>	<b>xi</b>
<b>1 Úvod a cíl práce</b>	<b>1</b>
<b>2 Spektrofotometrie</b>	<b>3</b>
2.1 Obecně . . . . .	3
2.2 Spektrofotometr . . . . .	5
2.3 Vliv teploty vzorku na výsledky experimentu . . . . .	6
2.3.1 Stabilita vzorku . . . . .	6
2.3.2 Dopplerovo rozšíření . . . . .	7
<b>3 Vstupní parametry</b>	<b>9</b>
3.1 Geometrie modelu . . . . .	9
3.1.1 Výchozí popis modelu (pevné parametry) . . . . .	10
3.1.2 Analyzátor . . . . .	10
3.1.3 Kyveta . . . . .	13
3.1.4 Pasta . . . . .	14
3.1.5 Izolace . . . . .	15
3.1.6 Krycí sklíčka . . . . .	15
3.2 Laser . . . . .	15
3.3 Peltierův článek . . . . .	16
3.4 Vzduch a Vzorek . . . . .	17
<b>4 Návrh a výpočet MKP modelu</b>	<b>19</b>
4.1 Úvod . . . . .	19
4.2 Předpoklady výpočtu a jejich ověření . . . . .	20
4.2.1 Reynoldsovo číslo . . . . .	20
4.2.2 Machovo číslo . . . . .	22
4.2.3 Biotovo číslo . . . . .	22

4.2.4	Rayleighovo, Prandtlovo a Grashofovo číslo . . . . .	23
4.3	Solid . . . . .	24
4.3.1	Tvorba sítě, volba elementů a interakce . . . . .	25
4.3.2	Interakce . . . . .	26
4.3.3	Okrajové podmínky a zatížení . . . . .	26
4.3.4	OP: radiace . . . . .	34
4.3.5	Step . . . . .	34
4.4	CFD . . . . .	35
4.4.1	Tvorba sítě . . . . .	35
4.4.2	OP: Přívod a odvod vzduchu . . . . .	36
4.4.3	Ko-simulační hranice . . . . .	37
4.4.4	Step . . . . .	37
<b>5</b>	<b>Zpracování výsledků a diskuze</b>	<b>40</b>
5.1	Zpracování výsledků . . . . .	40
5.1.1	Výchozí simulace . . . . .	40
5.1.2	Simulace s radiací . . . . .	46
5.1.3	Simulace s nastavenou vstupní rychlostí proudění $v = 300\text{ms}^{-1}$ . . . . .	48
5.1.4	Vliv laserového paprsku na rozložení teploty vzorku . . . . .	49
5.1.5	Vliv teploty na rozložení proudění . . . . .	54
5.1.6	Celkový pohled na rozložení tepelného toku . . . . .	56
5.1.7	Výsledky . . . . .	58
5.2	Diskuze . . . . .	59
5.2.1	Další optimalizace . . . . .	62
<b>6</b>	<b>Závěr diplomové práce</b>	<b>63</b>

## Seznam tabulek

3.1	Materiálové vlastnosti hliníku 6061 . . . . .	12
3.2	Materiálové vlastnosti skla N-BK7 . . . . .	13
3.3	Materiálové vlastnosti teplo-vodivé pasty Arctic Silver 5 . . . . .	14
3.4	DPSS 532 nm 1W laser DMPV-532-1 [14] . . . . .	15
3.5	Materiálové vlastnosti suchého vzduchu, přebráno z [18] . . . . .	18
3.6	Materiálové vlastnosti čisté vody, přebráno z [19] . . . . .	18
4.1	Tabulka hodnot pro definici film koeficientu mezery . . . . .	30
4.2	Indexy lomu při vlnové délce $\lambda = 532nm$ . . . . .	31
4.3	Vypočtené intenzity podle obr. 4.7 . . . . .	33
5.1	Průběh a maximální teploty pro oblast $t \in \langle 180; 330s \rangle$ . . . . .	44
5.2	Průběh a maximální teploty pro oblast $t \in \langle 630; 800s \rangle$ . . . . .	46
5.3	Rozdíl teplot mezi výchozí simulací a simulací s radiací pro vybrané časy . . . . .	47
5.4	Výsledné teploty a rozdíly pro vzájemné porovnání a zhodnocení . . . . .	58

## Seznam obrázků

2.1	Absorbční spektrum červeného barviva č.3, [15]	4
2.2	Schéma fotometru použitého pro DP	6
2.3	Vliv tepelného pohybu částic na změnu spektrálních čar [7]	8
3.1	Izometrický pohled na průřez modelem v programu ABAQUS	10
3.2	Řez modelem analyzátoru	11
3.3	Detail otvoru pro uložení kyvety	11
3.4	Multi-modulární peltierův článek, převzato z [8]	17
4.1	Pohled na vytvořenou síť sestavy bez izolace	25
4.2	Umístění okrajové podmínky peltierova článku na spodní části analyzátoru	26
4.3	Hladká amplituda pro definici teplotní OP	27
4.4	Vybraná stěna pro výpočet součinitele volné konvekce	28
4.5	Mezera(gap) označená červeně, přes kterou je zavedena interakce izolace-držák	29
4.6	Index lomu pro čistou vodu v závislosti podle [14]	31
4.7	Schéma změny intenzity v modelu	33
4.8	Detail sítě pro CFD část modelu	36
4.9	Pozice pro zavedení vstupních podmínek proudění	37
5.1	Zvolené pozice referenčních bodů pro porovnání teplot	41
5.2	Průběh měřené teploty referenčních bodů pro výchozí simulaci	42
5.3	Detail náběhové fáze výchozí simulace $t \in \langle 0; 70s \rangle$	43
5.4	Detail průběhu teplot při dosažení maximální teploty článku, $t=180-300s$	43
5.5	Detail průběhu teplot při poklesu OP, $t=320s$	45
5.6	Detail průběhu teplot na konci simulace, $t=800s$	45
5.7	Vliv radiace na rozdíl teplot v RB vzorku a pasty, detail začátku	46
5.8	Vliv radiace na rozdíl teplot v RB vzorku a pasty, detail ustálení $t \in \langle 220; 320s \rangle$	47
5.9	Vliv radiace na rozdíl teplot v ref. bodech izolace	48



5.10	Vliv změny vstupní podmínky rychlosti na změnu teploty proudění v prvních 3mm vstupních otvorů . . . . .	49
5.11	Vybrané osy (cesty) pro zobrazení průběhů teplot uvnitř vzorku .	50
5.12	Rozložení pole teplot vzorku pro vybrané $t = (1s, 135s, 300s, 800s)$	50
5.13	Rozložení pole teplot po hor. ose kolmé k paprsku, $t = (1s, 135s, 300s, 800s)$ . . . . .	51
5.14	Rozložení teploty vzorku v ose laserového paprsků pro vybrané $t = (300s, 800s)$ . . . . .	52
5.15	Rozložení teploty vzorku podél vertikální osy kolmé na laserový paprsek pro vybrané $t = (300s, 800s)$ . . . . .	53
5.16	Rozložení teploty vzorku včetně maximální dosažené a RB na vertikální ose v čase $t = 323s$ . . . . .	54
5.17	Pohled na rozložení rychlostního pole CFD části pro čas $t = 323s$	55
5.18	HFL - vektorové zobrazení tepelného toku pro vybrané $t = (114s, 568s)$ . . . . .	55
5.19	Reakce průběhu proudění na změnu teploty pro vybrané $t =$ $(114s, 568s)$ . . . . .	56
5.20	tepelný tok daný změnou teploty pro vybrané $t = (114s, 568s)$ . .	57

## Nomenclature

$A$	Plocha [mm <sup>2</sup> ]
$D_h$	Charakteristický průměr [mm]
$E$	Youngův modul pružnosti [N/mm <sup>2</sup> ]
$I$	Intenzita [W/mm <sup>2</sup> ]
$L$	Charakteristický rozměr [m]
$P$	Výkon [W]
$Q$	Objemový tepelný tok [W/mm <sup>3</sup> ]
$R$	Odraz
$T$	Teplota [°C]
$T$	Rychlost proudění [m/s]
$V_t$	Kontrolní objem [mm <sup>3</sup> ]
$r$	Rychlost světla [m s <sup>-1</sup> ]
$c_p$	Měrná tepelná kapacita při stálém tlaku [J/Kg/K]
$k$	Součinitel přestupu tepla - konvekce [Wm <sup>-2</sup> /K]
$k$	Součinitel tepelné vodivosti [W/m/K]
$m$	Hmotnost [kg]
$n$	Index lomu
$r$	Rádus [mm]
$t$	Čas [s]
$x$	Pozice [mm]

## Řecké Symboly

$\alpha$	Teplotní součinitel délkové roztažnosti [ $\text{K}^{-1}$ ]
$\lambda$	vlnová délka [nm]
$\varrho$	Hustota [ $\text{g}/\text{cm}^3$ ]
$\Delta T$	Rozdíl teplot [ $^{\circ}\text{C}$ ]
$\mu$	Dynamická viskozita [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}$ ]

## Seznam Zkratek

CAD	Computer Aided Design
CFD	Computational fluid dynamics
CFL	Courant–Friedrichs–Lewy podmínka stability
DP	Diplomová práce
MKP	Metoda konečných prvků
N-BK7	Optické borokřemičité sklo firmy Schott
OP	Okrajová podmínka
PMMA	Polymethylmethakrylát
PS	Polystyren
RB	Referenční bod
TK	Tepelný tok
UV	Ultrafialové

## Úvod a cíl práce

Pro experimentální metody zkoumání vzorku pomocí spektrální analýzy je pro nás důležité znát přesné parametry jednotlivých částí, kde u více citlivých experimentů může například nepřesně určená teplota vzorku mít na následek chybné stanovení koncentrace látek a znehodnotí se tak celé měření.

Pro minimalizaci této chyby jsem provedl simulaci chování modelu analyzátoru biologických vzorků pro spektrální analýzu, přesněji závislost měřené teploty mezi dvěma kontrolními (referenčními) body: Uvnitř zvoleného biologického vzorku (vody) a uprostřed kontrolního místa analyzátoru (otvoru) vyplněného teplovodivou pastou, kde by v reálném produktu bylo uloženo kontrolní tepelné čidlo.

Tato závislost bude změřena v rámci ko-simulace metodou konečných prvků pro analyzátor biologických vzorků s kyvetou uvnitř izolace a zatíženého příslušnými okrajovými podmínkami v kombinaci s CFD simulací ventilace modelu proudem suchého vzduchu.

Pro získání přesnějších výsledků a posouzení významnosti možných vstupních parametrů v relaci na jejich časové náročnosti provedu sérii MKP výpočtů a postupně se pokusím přiblížit k realitě blízkému modelu podle našich požadavků.

Hlavní obsah práce je rozdělen na několik částí, kde první část práce je zaměřena na popis **Spektrofotometrie**, vyšetřovací metody pro kterou je zkoumaný

model určen, **vlivu teploty na analýzu biologického vzorku** a popisem pro nás důležitých vlastností a parametrů. Druhá část je pak zaměřena na popis **vstupních parametrů** jako je geometrie a materiálové vlastnosti jednotlivých částí. V třetí části se pak zaměřím na samotný **popis návrhu jednotlivých simulací**, definici okrajových podmínek a působících sil v těchto simulacích spolu s doplněním předpokladů výpočtů a ověřením, či jejich odůvodněním.

Poslední část je pak zaměřena na zpracování a zhodnocení výsledků, jejich vzájemném porovnání a z nich vycházejících návrhů na možnou optimalizaci.

# Spektrofotometrie

## 2.1 Obecně

Spektrofotometrii se může chápat jako kvantitativní měření průchodu (absorpce) elektromagnetického záření různých vlnových délek skrz měřený (biologický) vzorek. Každá částice uvnitř vzorku má schopnost absorbovat, propustit, či odrazit určitou část elektromagnetického záření a využitím tohoto principu je možné pomocí spektrální analýzy získat tzv. **graf absorpčního spektra** (2.1), který se následně dá použít pro získání informací o zkoumaném vzorku (většinou kvantita a kvalita zkoumané látky).

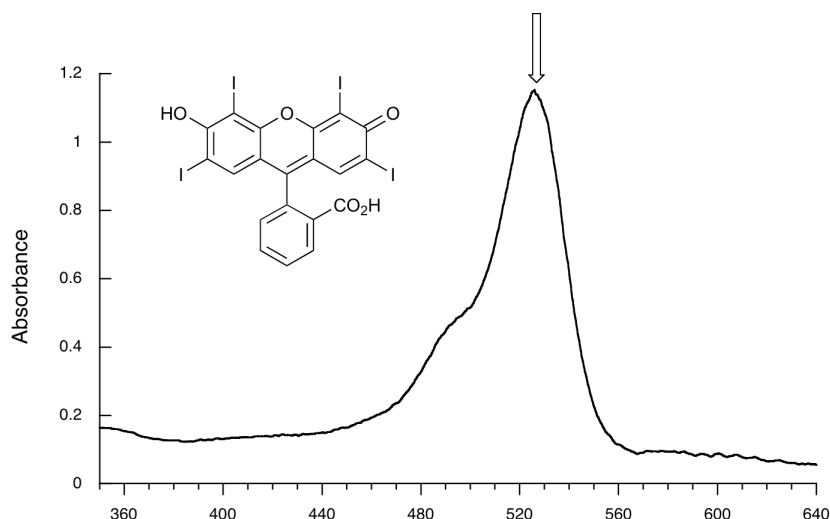
U většiny měření je pro nás důležitá veličina **Transmittance**(2.1), která udává poměr světla prošlého vzorkem a je definovaná jako poměr mezi intenzitou světla dopadajícího paprsku na kyvetu  $I_t$  a intenzitou světla, která vzorkem v kyvetě prošla  $I$ . V praxi musíme samozřejmě ještě tyto hodnoty upravit v závislosti na ztrátách vzniklých např. odrazem v kyvetě. Tato úprava se většinou provádí na základě slepého měření na prázdné kyvetě a následnou úpravou dalších měření se vzorky.

$$Transmittance(T) = \frac{I_t}{I_0} \quad (2.1)$$

Druhou důležitou veličinou je pak **Absorbance**(2.2), která udává množství pohlceného světla vzorkem. Absorbance může být definována buďto pomocí negativního logaritmu z transmittance, nebo pomocí **Beer-Lambertova zákona**(2.3), který udává závislost mezi absorbancí, optickou délkou kyvety  $l$  a molárním dekadickým absorpčním koeficientem  $\epsilon$ . Primárně však tento vztah použijeme inverzně pro zjištění koncentrace hledané látky v závislosti na transmittanci vypočtené ze zjištěné absorbance.[9][13]

$$\text{Absorbance}(A) = -\log(T) = \log\left(\frac{I_t}{I_0}\right) \quad (2.2)$$

$$A_\alpha = -\log_{10}\left(\frac{I_t}{I_0}\right) = \epsilon_\alpha \cdot l \cdot c = k \cdot c \quad (2.3)$$



Obrázek 2.1: Absorbční spektrum červeného barviva č.3, [15]

### 2.2 Spektrofotometr

Pro provedení spektrofotometrické analýzy se používá **Spektrofotometr** (v případě použití pouze jedné vlnové délky - fotometr). Toto zařízení se většinou skládá ze čtyř částí + doplňujících optických zařízení (čočky a zrcadla) a zařízení pro vyhodnocení výsledků:

**Zdroj záření** - žárovka, nebo speciální typ lampy (viditelná oblast - halogen, UV oblast - deuteriová). V případě diplomové práce je použit jako zdroj monochromatický laser s pevně stanovenou vlnovou délkou.

**Monochromátor** - typ optického zařízení pro změnu polychromatického záření na monochromatické (jedné vlnové délky). Závisí na typu oblasti spektra, nejběžněji se používá optická mřížka (difrakce), nebo optický hranol. Složitější spektrofotometr dokáže měnit vlnovou délku paprsku vstupujícího na vzorek podle požadavků experimentu a poskytne tak kompletnější rozbor vzorku. V případě návrhu DP, kdy s vlnovou délkou paprsku není potřeba manipulovat není nutné s ním uvažovat.

**Kyvetový prostor** - zařízení, ve kterém je uložena kyveta se vzorkem pro analýzu a má za úkol udržet danou kyvetu (a vzorek uvnitř) v rámci požadovaných parametrů, případně nám umožnit tyto parametry modifikovat. V mé práci je označen jako "Analyzátor biologických vzorků" a slouží jako hlavní zaměření DP.

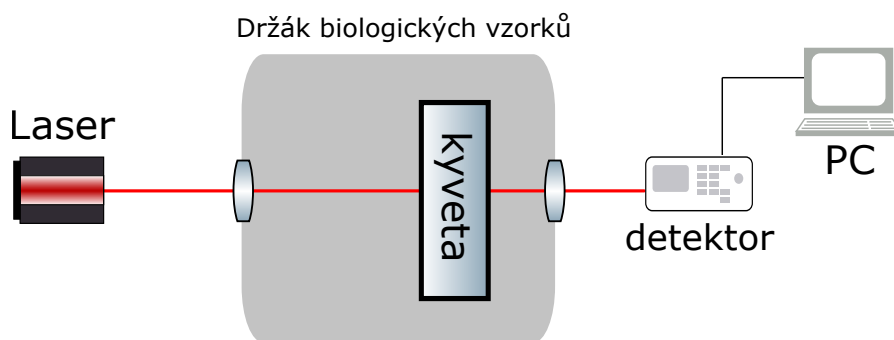
**Detektor** - fotoelektrický prvek, který má na starost vyhodnocení (porovnání) paprsku světla prošlého skrz vzorek. Existuje více typů detektorů v závislosti na počtu procházejících paprsků a jejich vyhodnocení, ale podle zaměření



DP to pro nás není důležité.

**Čočky a zrcadla** - spektrofotometr je doplněn o kombinaci zrcadel a čoček pro úpravu (odraz a lom) směru paprsku uvnitř naší optické soustavy.

**Výstupní zařízení** - připojený počítač, nebo plotter pro zaznamenání a vyhodnocení naměřených hodnot z detektoru. Může být použit pro zpětnou vazbu a následnou úpravu parametrů měření.



Obrázek 2.2: Schéma fotometru použitého pro DP

## 2.3 Vliv teploty vzorku na výsledky experimentu

### 2.3.1 Stabilita vzorku

Oproti práci s anorganickými vzorky, kdy většinou teplota v laboratoři (potažmo v analyzátoru) nehraje zásadní roli, je pro nezanedbatelné množství biologických vzorků závislost chemické (biologické) stability na teplotu důležitá.

Pro spoustu biologických vzorků může už pro hodnoty vyšší než  $T = 4^{\circ}\text{C}$  docházet k postupnému rozpadu a v případě dalšího zvyšování teploty, které

může vzniknout například dlouhodobou analýzou laserovým paprskem, případně externím vlivem např. potřeba terénní laboratoře v tropických podmínkách se rychlost degradace vzorku ještě urychlí.

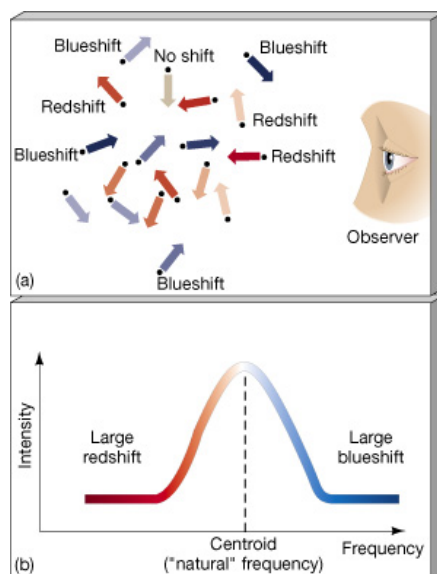
V opačném případě i pro použití studeného vzorku, nebo umístění analyzátoru v chladném prostředí může dojít k nechtěné kondenzaci na povrchu kyvety, která by mohla způsobit distorzi laserového paprsku a z toho vycházející nesprávné vyhodnocení analýzy.

Použitím analyzátoru s nastavením přesné regulace teploty je tak možné pracovat s velmi nízkými teplotami i pod bodem mrazu, při kterých nedochází k degradaci a je tak možná dlouhodobá analýza, případně i schopnost rovnou udržovat fyziologickou (pato-fyziologickou) teplotu uvnitř vzorku a přesněji tak zkoumat chování za specifických podmínek.[15]

### 2.3.2 Dopplerovo rozšíření

Dalším případem, který je důležitý v zejména situacích kdy se pracuje s velmi vysokou teplotou vzorku (jaderné reaktory, plasma), ale může nastat i v návrhové situaci DP, kdy dojde k ohřevu vzorku nad  $T = 90^{\circ}\text{C}$  je **Dopplerovo rozšíření** (Doppler broadening).

Dopplerovo rozšíření je jev, kdy vlivem zvýšení teploty vzorku dochází k urychlení tepelného pohybu částic, přesněji se změni rozsah pohybu jednotlivých částic a tak se i změni oblast kde dochází k absorpci záření (rozšíření spektrální/absorpčních čar). Urychlená částice se totiž začne pohybovat v závislosti k pozorovateli buďto blíže kdy bude zobrazovat svou spektrální čáru směrem k modrému okraji spektra, nebo naopak od pozorovatele, kdy dojde k posunu směrem k červenému okraji spektra.



Obrázek 2.3: Vliv tepelného pohybu částic na změnu spektrálních čar [7]

V případě pohybu v kolmé rovině pozorovatele nedojde k posunu spektrální čáry. Výsledné střední rozložení maxima normálního rozložení je pak dáno rovnicí (2.4)

$$(\Delta\lambda)_{1/2} = \frac{2\lambda_0}{c} \sqrt{\frac{2kT \ln 2}{m}} \quad (2.4)$$

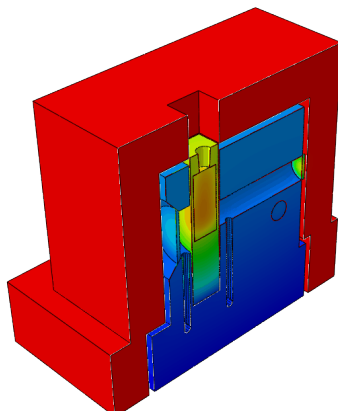
Kombinací pohybů částic dojde tak k změně absorpčních čar vzorku a v případě potřeby velmi přesné analýzy v oblasti práce s vyšší teplotou vzorku existuje možnost chybného stanovení výsledné hodnoty.[10][7]

## Vstupní parametry

### 3.1 Geometrie modelu

Na základě výchozích parametrů již existujícího návrhu kompletní sestavy pro spektrální analýzu byl vytvořen zjednodušený návrh samostatného analyzátoru biologických vzorků, doplněný o běžný model kyvety podle katalogu a ukryt do izolačního krytu dle vlastního návrhu.

Model analyzátoru má rozšířenou spodní část o shodném rozměru pro připojení peltierova článku podle katalogu (rozměr článku byl daný). Samotné tělo má pak tvar kvádru, skrz který je veden otvor pro průchod laserového paprsku s rozšířením pro umístění kyvety. Samotná kyveta je pak umístěna skrz izolaci do přizpůsobeného otvoru v analyzátoru. Nakonec jsou z boku analyzátoru vyvrtány otvory pro průchod chladicího proudu suchého vzduchu, které procházejí modelem až do otvoru pro laserový paprsek. Zmíněný chladicí proud pak opouští model mezerou mezi stěnami kyvety a samotnou kyvetou.



Obrázek 3.1: Izometrický pohled na průřez modelem v programu ABAQUS

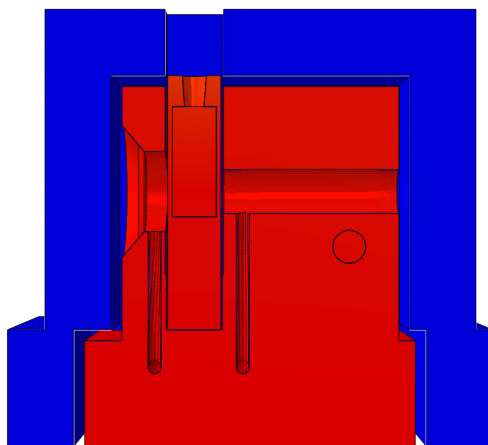
### 3.1.1 Výchozí popis modelu (pevné parametry)

### 3.1.2 Analyzátor

Běžný model analyzátoru (držáku) se většinou skládá z několika částí spojených pomocí šroubů pro usnadnění (zlevnění) výroby. Pro simulaci jsem se rozhodl vytvořit pouze tvarově zjednodušený, jednoduchý model z důvodu urychlení výpočtu a usnadnění simulace. Byly tak ovšem zanedbány tepelné ztráty vzniklé nedokonalým spojením jednotlivých částí (mikroskopické vzduchové mezery) a ztráty způsobené v souvislosti se spojovacím materiálem (šrouby).

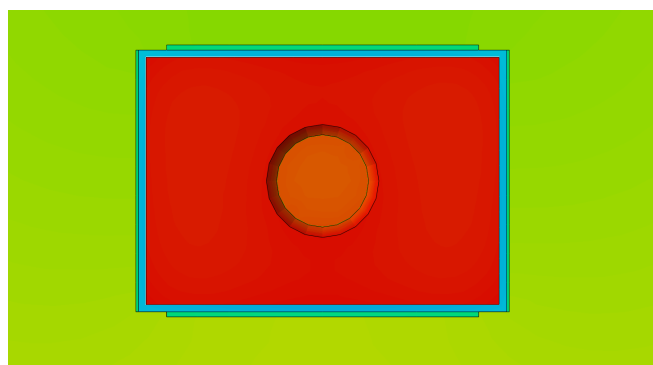
Jak už jsem zmínil dříve, tak spodní část byla rozměrově vytvořena souhlasně s velikostí peltierova článku a měla by být následně za okraje držáku přitlačena k zvolenému tepelnému článku uloženého ve zbytku kompletní sestavy pro minimalizaci vzduchové mezery.

Otvor pro uložení kyvety byl navrhnut tak, aby bylo možno přesně uložit kyvetu pro potřeby měření, nedošlo k poškození částí důležitých pro vyhodnocení



Obrázek 3.2: Řez modelem analyzátoru

analýzy (přední a zadní stěna kyvety, případné poškrábání rohů a bočních pro nás už tak důležité není) a zároveň byly minimalizovaný ztráty průchodu tepla vzduchovou mezerou viz obr.3.3



Obrázek 3.3: Detail otvoru pro uložení kyvety

### **Materiál: Aluminium**

Jako materiál jsem z důvodu dobrých mechanických vlastností, široké dostupnosti, slušné obrobiteľnosti a hlavně dobré tepelné vodivosti vybral slitinu hliníku 6061.

Jako alternativa se nabízí i jiné slitiny hliníku podobných vlastností, ale pro potřeby simulace je tato volba více než dostačující.[2]

Tabulka 3.1: Materiálové vlastnosti hliníku 6061

$\rho[\text{g}/\text{cm}^3]$	$k[\text{W}/\text{m} \cdot \text{K}]$	$c_p[\text{J}/\text{g} \cdot \text{K}]$
2.7	167	0.896

## Kontrola otvoru kyveta x sklo

Z důvodu přesného uložení a následného ohřívání (podchlazení) dvou rozdílných materiálů (sklo + hliník) v rozmezí od  $T \in \langle -70; 95^\circ\text{C} \rangle$  jsem pro kontrolu spočítal rozdíl vzájemné tepelné roztažnosti mezi držákem a kyvetou viz (3.1-4), aby nedošlo k dotyku(prasknutí).

Kyveta:

$$a_0 = a + \alpha\Delta T = 6.9 + 0.55 \times 10^{-6} \cdot 95 = 6.90076mm \quad (3.1)$$

$$b_0 = b + \alpha\Delta T = 4.82 + 0.55 \times 10^{-6} \cdot 95 = 4.82053mm \quad (3.2)$$

Otvor:

$$a_0 = a + \alpha\Delta T = (25.1 - 5.1) + 2.3 \times 10^{-4} \cdot 95 = 20.042mm \quad (3.3)$$

$$b_0 = b + \alpha\Delta T = (27 - 7) + 2.3 \times 10^{-4} \cdot 95 = 20.042mm \quad (3.4)$$

V porovnání s minimální rozměrem mezery  $d=1.2\text{mm}$  mezi kyvetou a analyzátozem zůstane stále rezerva a nemusíme se tak bát poškození kyvety.

### 3.1.3 Kyveta

Podle zadání původního projektu jsem použil netypickou kyvetu (podle rozměrů dokonce mikro-kyvetu) o vnějších rozměrech  $6.9\text{ mm} \times 4.82\text{ mm} \times 23\text{ mm}$  a vnitřním rozměru pro vzorek  $4\text{ mm} \times 3\text{ mm} \times 10\text{ mm}$  (0.12 ml). Jak je vidět z těchto rozměrů, tak je použita nestandardní optická délka kyvety (faktor) než je běžná délka  $l_{\text{op}} = 1\text{ cm}$ .

Vzhledem k tomu, že kyveta má být použita k optické vyšetřovací metodě, je pro nás důležitá opatrná manipulace při vkládání kyvety, aby nedošlo k poškození (poškrábání) částí, skrz které bude paprsek procházet.

Pro použití ve spektrální fotometrii v oblasti viditelného spektra se často používají kyvety z optického skla, nebo i levnější plastové (PS, PMMA), u kterých se pak musí počítat s horšími optickými vlastnostmi a v našem případě při použití biologických vzorků by i mohlo dojít k nechtěné chemické reakci. [9]

#### Materiál: Sklo N-BK7

Kyveta je vyrobena z běžně používaného optického borokřemičitého skla N-BK7 (obchodní název firmy Schott).

N-BK7 je velmi průzračné sklo o vysoké optické kvalitě pro použití v oblasti viditelného spektra.[1]

Tabulka 3.2: Materiálové vlastnosti skla N-BK7

$\rho[\text{g}/\text{cm}^3]$	$k[\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}]$	$c_p[\text{J}/\text{g}\cdot\text{K}]$	$E[\text{N}/\text{mm}^2]$
2.51	1.114	0.858	$82 \cdot 10^3$



### 3.1.4 Pasta

Pro kontrolu závislosti mezi teplotou uvnitř biologického vzorku a teplotou držáku, byl vyvrtán otvor o průměru 3 mm, do kterého byl následně zasunut teploměr a zafixován v otvoru pomocí teplo-vodivé pasty pro minimalizaci rozdílů mezi naměřenou a skutečnou hodnotou.

#### Materiál: Teplo-vodivá pasta

Pro výběr pasty bylo důležité splnit požadovaný rozsah teplot  $T \in \langle -70; 95^{\circ}\text{C} \rangle$  při dostatečné hodnotě koeficientu tepelné vodivosti materiálu.

S horním teplotním limitem nebyl problém (teplo-vodivé pasty už podle názvu dosahují vysoké odolnosti vůči vysokým teplotám), ale pro hodnoty pod bodem mrazu byl větší problém, kde většina výrobců jejich použití nedoporučuje.

Nakonec jsem zvolil pastu **Arctic Silver 5** od výrobce *Arctic Silver, Inc.*, která se běžně používá pro instalaci procesorů a grafických karet, ale je oblíbená i pro vědecké účely. Tato pasta dosahuje dobré tepelné vodivosti, ale minimální teplota, kterou se mi podařilo najít, byla doporučená minimální teplota pro běžné použití  $T=50^{\circ}\text{C}$ . Reálná minimální teplota pro krátkodobé použití tedy může být nižší, ale v případě že by bylo nutné mít zaručenou minimální hodnotu, tak existuje možnost použití kryogenických past, které jsou ovšem mnohem dražší a také mají řádově nižší tepelnou vodivost.[12]

Tabulka 3.3: Materiálové vlastnosti teplo-vodivé pasty Arctic Silver 5

$\rho[\text{g}/\text{cm}^3]$	$k[\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}]$	$c_p[\text{J}/\text{g}\cdot\text{K}]$	$T_{max}[^{\circ}\text{C}]$
4.05	8.9	0.842	130

### 3.1.5 Izolace

Pro další minimalizaci tepelných ztrát byl držák umístěn do izolačního krytu vyrobeného také z hliníkové slitiny 6061, oddělený od držáku mezerou o velikosti  $d=1\text{ mm}$ . Tento kryt také chrání držák před tepelnou ztrátou vzniklou volnou (případně i nucenou) konvekcí vzduchem v laboratoři. V horní části byl ponechán otvor pro manipulaci s kyvetou, aby nebylo nutné během analýzy s izolací manipulovat.

### 3.1.6 Krycí sklíčka

Pro umožnění průchodu laserového paprsku a zároveň zamezení úniku proudu suchého vzduchu pumpovaného soustavou byly k světelně průchodné části zaslepeny pomocí krycích sklíček. Jako použitý materiál jsem znovu zvolil optické sklo N-BK7.

## 3.2 Laser

Na základě specifikací originálního návrhu, kde se počítá se zeleným laserovým paprskem o výkonu  $P = 1\text{ W}$  byl zvolen laser **DMPV-532-1** od firmy *Del Mar Photonics* s parametry:

Tabulka 3.4: DPSS 532 nm 1W laser DMPV-532-1 [14]

$\lambda[\text{nm}]$	P[mW]	Kvalita paprsku[M2]	Typ paprsku
532	1000	$<1.2$	TEM00

### 3.3 Peltierův článek

Regulace teploty sestavy byla zajištěna pomocí peltierova článku připevněného k spodní části držáku. Podle výchozích požadavků, které nám určovaly rozměr pro připojení ( $30\text{ mm} \times 30\text{ mm}$ ) a požadovaný teplotní rozsah  $T \in \langle -70; 95^\circ\text{C} \rangle$  jsem vybral následující článek:

**PELTIER MS5,257,10,15,11,W8**

**Výrobce:** Laird Industries, Inc.

**Rozměry:**  $30\text{ mm} \times 30\text{ mm} \times 23.39\text{ mm}$

**Max. operační teplota:**  $105^\circ\text{C}$

**Náběhová teplota:**  $30^\circ\text{C/s}$

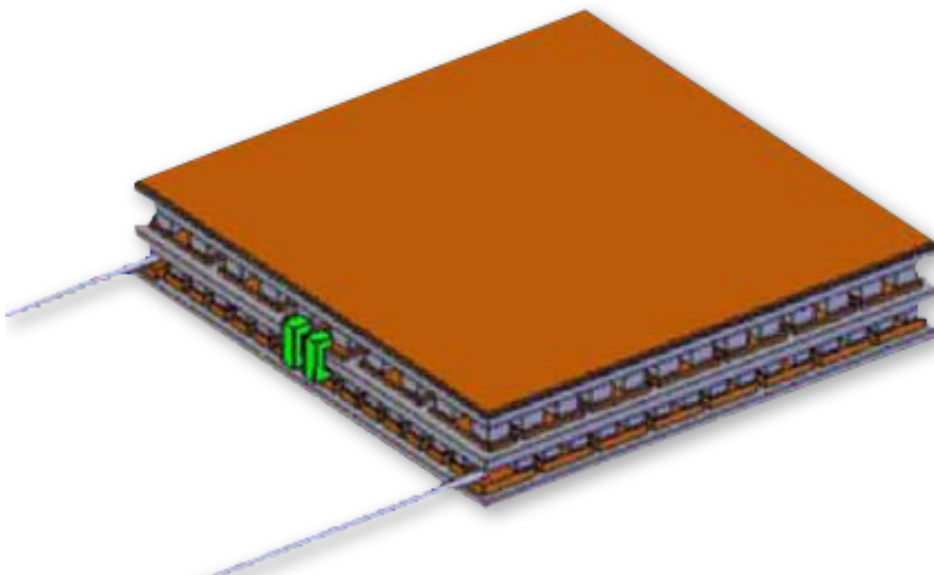
**Max. proud:**  $1.6\text{ A}$

**Max. napětí:**  $14.5\text{ V}$

$Q_{max}@T_h : 2.0\text{ W}@25^\circ\text{C}$

$\Delta T_{max}@T_h : 123^\circ\text{C}@25^\circ\text{C}$

Vzhledem k tomu, že požadovaný tepelný rozdíl, který máme v plánu aplikovat na držák převyšuje  $70^\circ\text{C}$  je již potřeba použít multi-modulární článek.[8]



Obrázek 3.4: Multi-modulární peltierův článek, převzato z [8]

### 3.4 Vzduch a Vzorek

Pro účely CFD ko-simulace bylo potřeba zadefinovat materiálové vlastnosti použitých tekutin, v našem případě **suchého vzduchu** a **biologického vzorku**.

Materiálové vlastnosti suchého vzduchu jsem bral z [18] a pro z důvodu vyšší závislosti změny materiálových vlastností na teplotě oproti materiálům ze solidní části jsem zvolil vlastnosti podle teplot z intervalu  $T \in \langle -70; 95^{\circ}\text{C} \rangle$  podle zadání úlohy. CAD model vzduchu pro CFD simulaci byl vytvořen jako inverzní model k zbytku soustavy (mold).

### KAPITOLA 3. VSTUPNÍ PARAMETRY

Tabulka 3.5: Materiálové vlastnosti suchého vzduchu, přebráno z [18]

$T[^\circ\text{C}]$	$k[10^{-5}\text{kW}/\text{m} \cdot \text{K}]$	$\rho[\text{kg}/\text{m}^3]$	$c_p[\text{kJ}/\text{kg} \cdot \text{K}]$	$\mu[10^{-5}\text{kg}/\text{ms}]$
-48	2.020	1.756	1.0027	1.467
-23	2.227	1.569	1.0031	1.599
2	2.428	1.412	1.0038	1.725
27	2.624	1.285	1.0049	1.846
52	2.816	1.177	1.0063	1.962
77	3.003	1.086	1.0082	2.075

Materiálové hodnoty (také v závislosti na teplotě) pro biologický vzorek jsem pro účel simulace bral podle parametrů čisté vody z [19] (v dalších simulacích, kdy by nás zajímal konkrétní vztah mezi teplotou vybraného vzorku a držákem je možno tyto parametry jednoduše změnit, pro výchozí simulaci je spíše důležité navrhnout univerzální model). Pro vzorek pro teploty pod bodem mrazu jsem uvažoval parametry z prvního řádku (čistá voda by samozřejmě v této situaci zamrzla, ale pro tuto simulaci nás to nezajímá).

Tabulka 3.6: Materiálové vlastnosti čisté vody, přebráno z [19]

$T[^\circ\text{C}]$	$\rho[\text{g}/\text{cm}^3]$	$k[\text{mW}/\text{m} \cdot \text{K}]$	$c_p[\text{kJ}/\text{kg} \cdot \text{K}]$	$\mu[\text{mPas}]$
2	0.99985	560.4	4.22	1.6758
27	0.99705	614.5	4.18	0.8502
52	0.98894	640.6	4.18	0.5293
77	0.97484	667.02	4.18	0.367

## Návrh a výpočet MKP modelu

### 4.1 Úvod

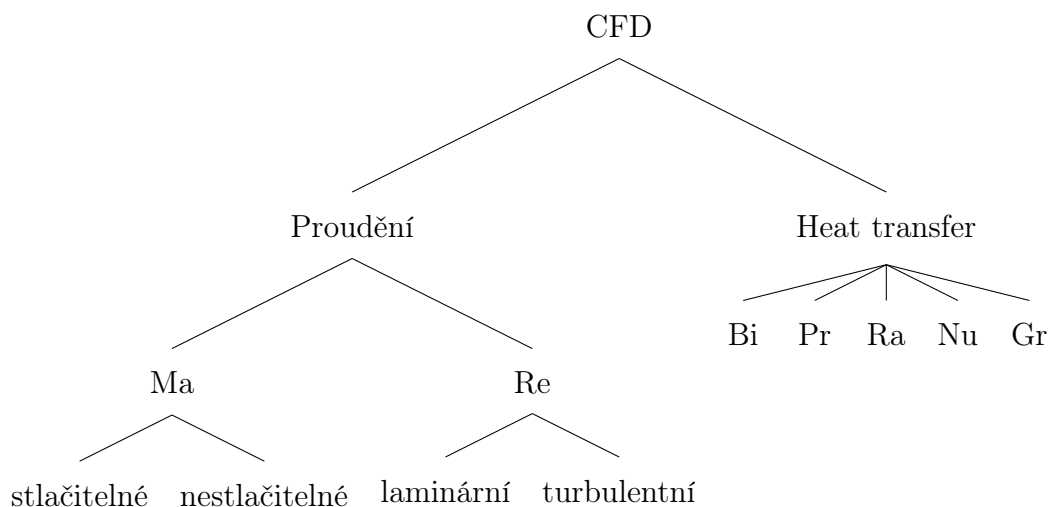
Na základě geometrie z předchozí části jsem v CAD programu **SolidWorks Rx 2015** firmy *Dassault Systèmes* vytvořil kompletní model sestavy včetně modelu vzduchu pro CFD ko-simulaci a následně importoval do výpočetního programu **Abaqus 6.14** od stejné firmy, přesněji do jejich pod-částí **Abaqus/Standart** a **Abaqus/CFD**.

Před samotnou prací v MKP programu jsem nejprve ověřil předpoklady výpočtů (případně odvodil hodnoty koeficientů pro výpočet pomocí zmíněných předpokladů) a provedl volbu referenčních bodů na základě předběžného zhodnocení význačných oblastí.

V programu **Abaqus** jsem pak na základě parametrů z předchozích kapitol a spočtených z předpokladů navrhl sérii ko-simulací pro pokrytí několika možných situací chování modelu, které by mohli nastat a bylo vhodné je tak mezi sebou porovnat a zhodnotit.[6]

## 4.2 Předpoklady výpočtu a jejich ověření

Pro definici okrajových podmínek a předpokladů výpočtu jsem provedl několik ověření přes výpočet bezrozměrných čísel (Reynolds, Mach, apod.) a zbylé předpoklady, které by bylo složité jinak ověřit jsem se na základě zkušeností cizích a vlastních pokusil odhadnout.[3]



### 4.2.1 Reynoldsovo číslo

Reynoldsovo číslo nám dává do poměru setrvačné síly uvnitř tekutiny k její viskozitě a na základě jeho velikosti můžeme určit dominanci laminárních, nebo turbulentních sil ve zkoumaném proudění a zda je možné zanedbat viskózní síly v tekutině.[3]

Pro jeho výpočet byl použit vzorec (4.1) doplněný o následující parametry.

$$Re = \frac{\rho V L}{\mu} \quad (4.1)$$

kde:

$L$  = charakteristický rozměr

$V$  = rychlost proudění

$\mu$  = dynamická viskozita

$\varrho$  = hustota tekutiny

Pro simulaci byla provedena kontrola pro dvě lokace:

**Vstup chlazení** - vstupní kanál o charakteristickém průměru  $D_h = 1.21$  mm

**Nejužší část prostoru mezi kyvetou a držákem** - charakteristický rozměr je dán podle vzorce (4.2), kde  $a=0.14$  mm a  $b=5$  mm.

$$L_{mezera} = \frac{2ab}{a+b} = \frac{2 \cdot 0.14 \cdot 5}{0.14} = 0.272 \text{ mm} \quad (4.2)$$

Pro tyto dvě oblasti pak dosadíme do rovnic (4.3) hodnoty pro suchý vzduch o hustotě  $\varrho = 1.177 \text{ kg/m}^3$ , dynamické viskozitě  $\mu = 1.846 \times 10^{-5} \text{ kg/ms}$  a rychlosti  $V = 0.01 \text{ m/s}$ .

$$Re_{trubka} = \frac{1.177 \cdot 0.01 \cdot 0.00121}{1.846 \times 10^{-5}} = 0.7714 \quad (4.3)$$

$$Re_{mezera} = \frac{1.177 \cdot 0.01 \cdot 0.0028}{1.846 \times 10^{-5}} = 1.785 \quad (4.4)$$

Podle výsledků je vidět, že Reynoldsovo číslo dosahuje nízkých hodnot, takže můžeme usuzovat proudění jako laminární, ale zároveň nedosáhneme až tak nízkých hodnot, aby bylo možné zanedbat viskózní síly



### 4.2.2 Machovo číslo

Machovo číslo nám porovnává rychlost proudění zkoumaného proudění k rychlosti vzduchu v daném médiu viz. (4.5). Toto porovnání nám pomůže určit, zda je naše proudění stlačitelné. Rychlost zvuku ve vzduchu o teplotě  $T=25^{\circ}\text{C}$  je  $c_{25^{\circ}\text{C}} = 346.3 \text{ m/s}$  a rychlost proudění zůstává  $V = 0.01 \text{ m/s}$ . [3]

**Ma** < **0.3** proudění je nestlačitelné

**0.3** < **Ma** < **0.8** proudění je slabě stlačitelné

**Ma** > **0.8** proudění je stlačitelné

$$Ma = \frac{V}{c} = \frac{0.01}{346.4} = 2.88 \times 10^{-5} \quad (4.5)$$

Vzhledem k tomu, že vypočtená hodnota se nachází bezpečně pod spodní hranicí, můžeme počítat s prouděním v naší simulaci jako s nestlačitelným.

### 4.2.3 Biotovo číslo

Pomocí Biotova čísla můžeme určit zda nám v počítaném modelu dominuje vnitřní konduktivní odpor, nebo naopak vnější konvektivní odpor. Na základě poměru těchto odporů definovaných pomocí rovnice (4.6) je vidět, zda je možné zanedbat teplotní gradienty uvnitř zkoumaného tělesa (tedy můžeme pro okrajové podmínky počítat  $T(x, t) \equiv T(t)$ ), nebo je nutné hodnotu teploty pro výpočet okrajových podmínek přiřadit funkcí. [17]

**Bi**  $\ll$  **1** vnitřní konduktivní odpor je zanedbatelný (běžně v situaci při  $Bi < 0.1$ )

$Bi \gg 1$  vnější konvektivní odpor je zanedbatelný (počítáme v situaci  $Bi > 40, 100$ )

$Bi \approx 1$  termické odpory jsou na stejné úrovni

$$Bi = \frac{L_c/k}{1/h} = \frac{h \cdot L_c}{k} \quad (4.6)$$

Charakteristický rozměr  $L$  je v tomto případě určen jako poměr objemu  $V_t$  zkoumaného tělesa k jeho ploše  $A_{povrch}$ ,  $k$  označuje tepelnou konduktivitu držáku a  $h$  vyjadřuje součinitel volné konvekce suchého vzduchu. Hodnoty  $V_t$  a  $A_{povrch}$  jsem pro mojí simulaci získal přímo z programu **Solidworks** pomocí kontrolního modulu a dosadil do rovnice (4.7) a následně použil pro výpočet Biotova čísla držáku.

$$L_c = \frac{V_t}{A_{povrch}} = \frac{17615mm^3}{3962.6mm^2} = 4.4453 \times 10^{-3}m \quad (4.7)$$

$$Bi = \frac{3.915 \cdot 4.4453 \times 10^{-3}}{230} = 7.566 \times 10^{-5} \quad (4.8)$$

Biotovo číslo ukazuje na situaci při  $Bi < 0.1$ , je tedy možné vnitřní konduktivní odpor zanedbat a nastavit OP přímo pomocí teploty.

#### 4.2.4 Rayleighovo, Prandtlovo a Grashofovo číslo

Tyto tři čísla nám specifikují a rozdělují vlastnosti volného konvekčního proudu, který nám obtéká držák biologických vzorků v laboratoři.[17]

**Grashofovo číslo** poměr vztlakových sil k viskózním silám, určuje sílu volné konvekce a její limit pro přestup do turbulentní oblasti. Viz rovnice (4.9)

$$Gr = \frac{gL^3\beta\delta T}{\nu^2} \quad (4.9)$$

**Prandtlovo číslo** poměr molekulární difusivity (změny teploty) k změně rychlosti, vyjadřuje zda v kapalině převládá přenos tepla konvekcí ( $Pr \ll 1$ ), nebo naopak kondukcí ( $Pr \gg 1$ ). Viz rovnice (4.10)

$$Pr = \frac{\mu c_p}{k} \quad (4.10)$$

**Rayleighovo číslo** kombinace Grashofova a Prandtlova čísla, většinou používané pro výpočty, nebo definici vigorózní volné konvekce (4.11)

$$Ra = Gr \cdot Pr \quad (4.11)$$

Zmíněné podobností čísla jsem následně vypočítal pro oblasti kolem vertikálních stěn izolace držáků a určil tak koeficient volné konvekce vzduchu pro stanovení okrajové podmínky zmíněné izolace (výpočet je proveden v části **Solid** - okrajové podmínky)

## 4.3 Solid

Model pro solidní část simulace byl importován do modulu **Abaqus/Standart** jako **deformable rigid** v Lagrangeovy konfiguraci.

Pro výchozí simulaci byly použity pouze parametry potřebné pro vyšetření tepelného přestupu v modelu a parametry pro elastickou deformaci byly zatím vynechány.

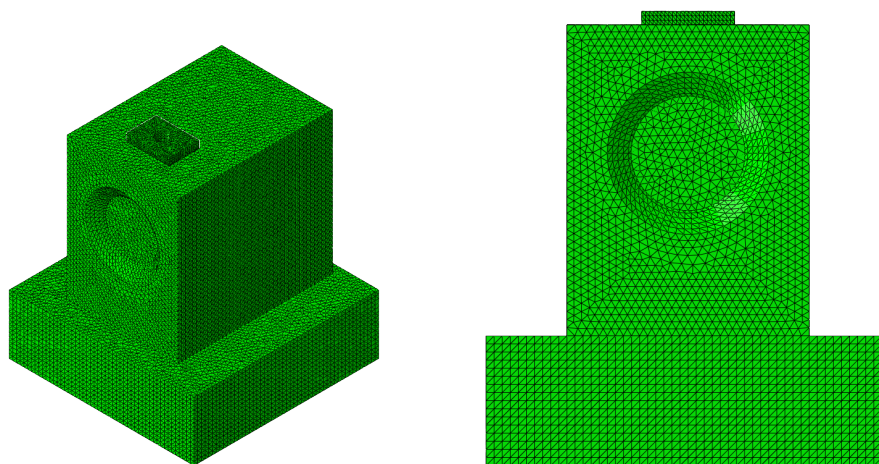
Výchozí teplota sestavy (s výjimkou CFD části) byla určena podle standardní teploty v laboratoři na  $T_{lab} = 23^{\circ}\text{C}$

### 4.3.1 Tvorba sítě, volba elementů a interakce

#### Tvorba sítě a volba elementů

Sestava byla vysítována pomocí 798 244 elementů typu **DC3D4**. **DC3D4** je 3D tetrahedron lineárního typu pro vyšetřování čistého tepelného přestupu se stupněm volnosti 11 (Teplotou).

Lineární element byl zvolen z důvodu lepší komunikace s elementy CFD ko-simulace (při volbě kvadratických elementů může na interakční vrstvě dojít k chybám). Trojúhelníkové elementy namísto čtvercových byly zvoleny z důvodu nižšího celkového množství použitých elementů (neměl by zde vzniknout zásadní rozdíl v potřebě celkového výpočetního času) a z důvodu jednoduššího provedení vysítování složitější geometrie.[6]



Obrázek 4.1: Pohled na vytvořenou síť sestavy bez izolace

V oblastech, kde se nacházela ko-simulační hranice byla vytvořena tenká **boundary** vrstva pro lepší zobrazení interakce CFD části s částí solidu.

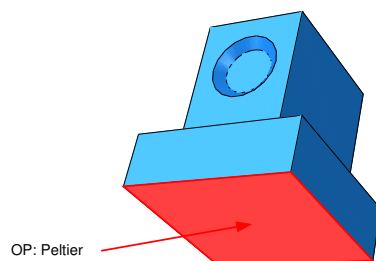
### 4.3.2 Interakce

Jednotlivé součásti byly mezi sebou v modulu interakce spojeny pevnou (**no-slip**) vazbou a počítalo s dokonalým spojením (nulovou vzduchovou vrstvou) tedy i nulovým konduktivním odporem na rozhraní dvou součástí.

### 4.3.3 Okrajové podmínky a zatížení

#### OP: Peltier

Hlavní řídicí okrajovou podmínkou, pro kterou i hledám závislost na rychlost reakce ve vzorku pro vybraný bod teplo-vodivé pasty pro umístění teploměru je určení teploty pomocí **peltierova článku**. [8]



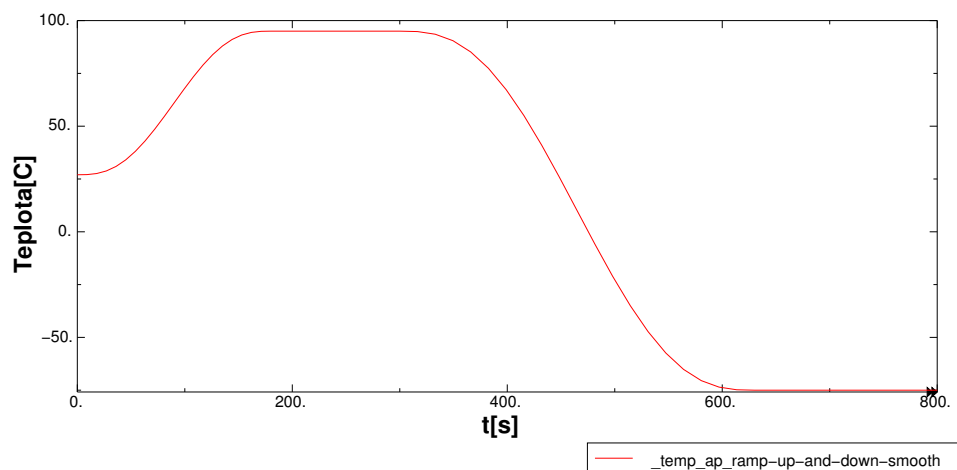
Obrázek 4.2: Umístění okrajové podmínky peltierova článku na spodní části analyzátoru

Podle rozvržení originální soustavy jsem se ji rozhodl umístit na spodní část držáku viz. obr. 4.2 a podle vybraného modelu peltierova článku z materiálové sekce jsem ji definoval jako hladkou funkci s parametry:

**Teplotní náběh:**  $30^{\circ}\text{C/s}$

**Rozsah operační teploty:**  $T_{\text{rozsah}} \in \langle -70^{\circ}\text{C}; 95^{\circ}\text{C} \rangle$

**Časová prodleva pro ustálení:** 120s



Obrázek 4.3: Hladká amplituda pro definici teplotní OP

### OP: konvekce

Konvekční okrajová podmínka, která v simulaci nahrazuje vliv volné konvekce vzduchem v laboratoři byla umístěna na aplikovatelnou vnější část izolace.

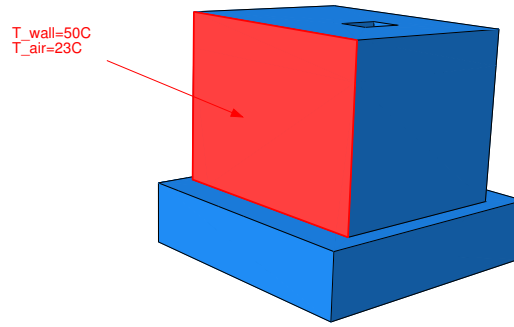
Pro její stanovení bylo potřeba stanovit referenční teplotu v laboratoři (zvolil jsem  $T_{\infty} = 23^{\circ}\text{C}$ ) a velikost **film koeficientu** pro volnou konvekci. Hodnota koeficientu byla určena z inverzního výpočtu **Nuseltova čísla** rovnicí (4.13).

$$\bar{N}u = \frac{\bar{h} \cdot k}{L} \longrightarrow \bar{h} = \frac{\bar{N}u \cdot k}{L} \quad (4.12)$$

Samotné **Nuseltovo číslo** jsem vypočítal pomocí rovnice (4.13), která je určená pro laminární tok přes vertikální plochy a pro které jsem musel vypočítat **Grashofovo, Rayleghovo a Prandtlovo číslo** podle už stanovených rovnic (4.9), (4.11) a (4.10)

$$\bar{Nu} = 0.68 + \frac{0.67 \cdot Ra^{1/6}}{[1 + (0.492/Pr)^{9/16}]^{4/9}} \quad Ra \leq 10^9 \quad (4.13)$$

Parametry pro výpočet **Nuseltova čísla** byly změřeny na zvolené vertikální stěně izolace viz 4.4 a jako referenční teplota stěny byla zvolena  $T_w = 50^\circ\text{C}$ . Referenční teplota stěny je potřeba pro výpočet  $\beta$  (4.15) u **Grashofova čísla**. [17][5]



Obrázek 4.4: Vybraná stěna pro výpočet součinitele volné konvekce

$$T_f = \frac{T_w + T_\infty}{2} = \frac{23 + 50}{2} = 36.5^\circ\text{C} \quad (4.14)$$

$$\beta = \frac{1}{T_f} = \frac{1}{36.5} = 0.003356 \quad (4.15)$$

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{1.568 \cdot 10^{-5}}{22.07 \cdot 10^{-6}} = 0.707 \quad (4.16)$$

$$Gr = \frac{L^3 \cdot g \cdot \beta \cdot (T_w - T_\infty)}{\nu^2} = \frac{0.029^3 \cdot 9.82 \cdot 0.003356 \cdot (50 - 23)}{(1.568 \cdot 10^{-5})^2} \quad (4.17)$$

$$= 88177.26024 \quad (4.18)$$

$$Ra = Gr \cdot Pr = 88177.26024 \cdot 0.707 = 127793.1308 \quad (4.19)$$

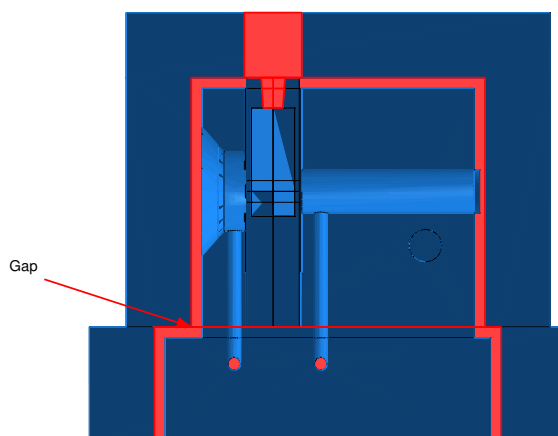
$$\bar{Nu} = 0.68 + \frac{0.67 \cdot (127793.1308)^{1/6}}{[1 + (0.492/0.707)^{9/16}]^{4/9}} \quad (4.20)$$

$$= 4.327 \quad (4.21)$$

$$\bar{h} = \frac{3.327 \cdot 2.624 \cdot 10^{-5}}{0.029} = 3.915 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K} \quad (4.22)$$

#### OP: kondukce přes tenkou vzduchovou mezeru

Zajištění přenosu tepla, které probíhá primárně mezi držákem a izolací přes tenkou vzduchovou vrstvu, ale i například mezi kyvetou a izolací bylo provedeno přes definici **film koeficientu** pro plochy ve styku s mezerou(gap) jak je zobrazeno na obr. 4.5.[20]



Obrázek 4.5: Mezera(gap) označená červeně, přes kterou je zavedena interakce izolace-držák

Pro stanovení parametrů film koeficientu vzal **Abaqus** hodnoty z proložené



hladké funkce získané podle hodnot tabulky 4.1, kde při čistém kontaktu (nulové mezeře) je určená hodnota dána koeficientem tepelné vodivosti materiálu (hliníková slitina 6061), pro vzdálenost  $d=6$  mm už se počítá přenos jako nulový (z důvodu minimalizace zbytečných výpočtů, které už nemají na výsledek vliv) a pro vzdálenost  $d=1$  mm jsem převzal změřený koeficient podle experimentu provedeného v[20]. Zbylé hodnoty byly odhadnuty pro zlepšení tvaru funkce a minimalizace chyb například pro rohy kyvety.

Tabulka 4.1: Tabulka hodnot pro definici film koeficientu mezery

$k[\text{mW}/\text{mm} \cdot \text{K}]$	mezera[mm]
167	0
10	0.001
2	0.01
0.02227	1
0	6

### Zatížení: Laser

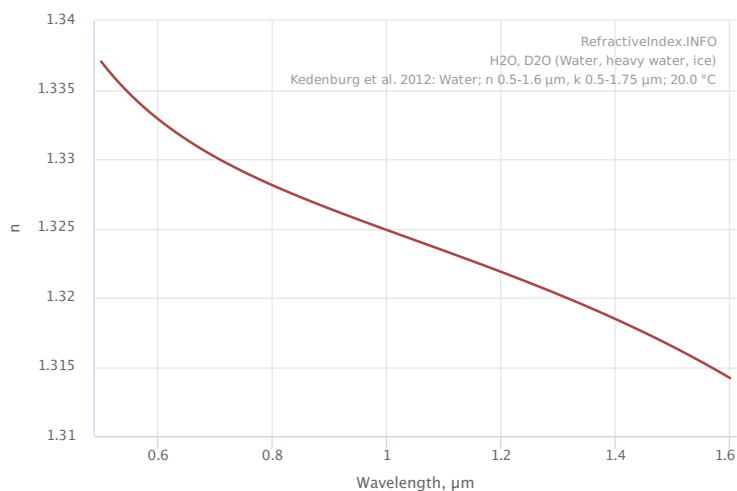
Tepelné zatížení, které vznikne vlivem absorpce laserové paprsku světla vzorkem(kyveta) jsem definoval pomocí tří variant řešení (simple volumetric heat flux, concentrated heat flux a gaussian distribution heat flux). Tyto tři varianty jsem následně mezi sebou porovnal a vybral podle vhodnosti do finální simulace. Porovnání bylo provedeno ve variantě, kdy bude vzorek(voda) v simulaci nastaven jako **solid** model

Jako základní parametry jsem bral výkon laseru **DMPV-532-1** z předchozí kapitoly o parametrech o velikosti  $P = 1\text{W}$  a o průměru paprsku  $d = 2\text{mm}$ . Intenzita paprsku je pak určena podle vzorce (4.29). Tato vypočtená intenzita musí být ovšem ještě upravena o odraz při průchodu skrz **krycí sklíčko** a následně na

povrchu **kyvety** a na rozhraní **sklo/vzorek**. Získané intenzity jsou pak použity pro výpočet jednotlivých objemových tepelných toků jednotlivých částí.[14]

Tabulka 4.2: Indexy lomu při vlnové délce  $\lambda = 532nm$

Materiál	index lomu $n$
sklo N-BK7	1.519473
vzduch	1
voda	1.3337



Obrázek 4.6: Index lomu pro čistou vodu v závislosti podle [14]

Celková ztráta odrazu pak byla vypočtena podle **Fresnelovy rovnice** (4.23).

Kde:

$n_o$  = index lomu prvního média

$n_G$  = index lomu druhého média

$$Odras[\%] \quad R = \frac{(n_o - n_G)^2}{(n_o + n_G)^2} 100 \quad (4.23)$$

$$R_{vzduch-sklo} = \frac{(1 - 1.519473)^2}{(1 + 1.519473)} 100 = 4.251\% \quad (4.24)$$

$$R_{sklo-voda} = \frac{(1.519473 - 1.3337)^2}{(1.519473 + 1.3337)} 100 = 0.424\% \quad (4.25)$$

Kompletní ztráta odrazem skrz jednu vrstvu materiálu při zanedbání absorpce a je pak možné přímo vypočíst podle vzorce:

$$R_{komplet}[\%] = \frac{200 \cdot R}{100 + R} \quad (4.26)$$

$$R_{sklko} = \frac{200 \cdot 4.251}{100 + 4.251} = 8.156\% \quad (4.27)$$

$$R_{vzorek} = \frac{200 \cdot 0.424}{100 + 0.424} = 0.844\% \quad (4.28)$$

Na rozhraní vzduch-kyveta pak znovu ztratíme 4.251% intenzity paprsku (celkově) před samotnou absorpcí tepla v přední skleněné části kyvety.

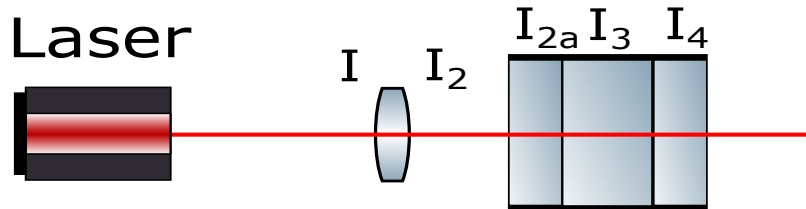
Následné ztráty z důvodu menšího rozdílu na rozhraní sklo-voda dosahují už pouze 0.424% resp. 0.844% před zadní skleněnou částí kyvety.

Výsledné intenzity podle obr. 4.7 jsou tedy:

$$I = \frac{P}{A} T = \frac{1000}{\pi \cdot 0.5^2} 1 = 1273,24 mW/mm^2 \quad (4.29)$$

$$I_1 = 1273,24 \cdot \frac{100 - 4.251}{100} = 1219 mW/mm^2 \quad (4.30)$$

Dále jsem podle podkladů firmy Schott ke sklu **N-BK7** z nalezené transmi-



Obrázek 4.7: Schéma změny intenzity v modelu

Tabulka 4.3: Vypočtené intenzity podle obr. 4.7

$I_1[mW/mm^2]$	$I_2[mW/mm^2]$	$I_{2a}[mW/mm^2]$	$I_3[mW/mm^2]$	$I_4[mW/mm^2]$
1219	1173	1122.08	1117.24	1112.26

sivity  $T = 0.99839807589$  pro vzorek o tloušťce  $10mm$  při  $\lambda = 532nm$  spočítal podle vzorce (4.31) **absorbanci** na 1 mm skla, kterou jsem následně využil pro výpočet objemového toku tepla do rovnice (4.32).[1]

$$\alpha_{NBK7-1mm} = \frac{\ln \frac{100}{99.839807589}}{10} = 6.96 \cdot 10^{-4} mm^{-1} \quad (4.31)$$

$$Q_{2a} = I_2 \cdot \alpha_{NBK7-1mm} = 0.781 mW/mm^3 \quad (4.32)$$

Pro výpočet absorpčního koeficientu u vzorku(vody) jsem pak použil hodnotu z tabulky podle [16] pro čistou vodu při vlnové délce  $\lambda = 532nm$  o velikosti absorpčního koeficientu  $\alpha_{H_2O} = 0.0000627 mm^{-1}$  a znovu dosadil do rovnice (4.33).

$$Q_3 = I_3 \cdot \alpha_{H_2O} = 0.07005 mW/mm^3 \quad (4.33)$$

Vypočtené objemové tepelné toky pak byly přiřazeny v **Gaussově rozložení** podle (4.34) na odpovídající segmenty válce výřezu skrz kyvetu a vzorek podle obr. 4.7. Gaussovo rozložení bylo určeno z důvodu přiblížení se k věrnosti skutečnému laserovému paprsku.

$$I(r) = I_0 \exp - \frac{2 \cdot r^2}{\omega_0^2} \quad (4.34)$$

kde:

$$r^2 = x^2 + y^2$$

#### 4.3.4 OP: radiace

Pro kontrolní simulaci byl zaveden vliv radiace pomocí tří okrajových podmínek pro kyvetu, izolaci a samotný analyzátor.

Okrajové podmínky byly definované na vnějších plochách jednotlivých částí (v případě kyvetu nebyla OP definována na kontaktních plochách se vzorkem). Pro výpočet byla použita hodnota pro teplotu **absolutní nuly**  $T_{0K} = -273.15^\circ\text{C}$  a **Stefan–Boltzmannovu** konstantu  $\sigma = 5.670367 \cdot 10^{-8} \text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$ . [3]

#### 4.3.5 Step

- Celá simulace byla provedena v jednom kroku z důvodu podmínky řešení ko-simulační úlohy, která musí proběhnout pouze v jednom kroku.
- Úloha tepelného přenosu byla řešena jako **transient** (nestacionární) z důvodu potřeby reakce na vnitřní změny, zejména pro interakce mezi prouděním a solidní částí

- Celkový čas kroku byl pak nastaven podle potřebného času pro naběhnutí tepelného článku plus byl odhadem přidán čas pro ustálení teploty v modelu.  
 $t=800s$
- Nakonec byl pro krok nastaven pro automatický přechod na další část simulace při dosažení stavu, při kterém je změna teploty minimální ( $\Delta T < 0.1^{\circ}C$ )

### 4.4 CFD

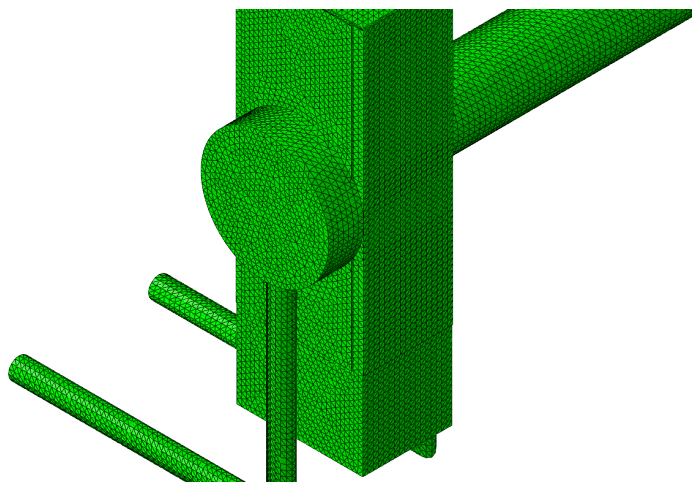
Stejně jako v předchozí části, byl model exportován z programu **SolidWorks**, kde byl získán tvorbou inverzní modelu (formy) k modelu držáku bez izolace. Pro tuto část, která byla provedena v modulu **Abaqus/CFD** bylo možné zvolit pouze konfiguraci **Fluid** v Eulerovské geometrii.

Pro celý model byly zvoleny tepelně závislé parametry **suchého vzduchu** z předchozí kapitoly.

#### 4.4.1 Tvorba sítě

Jako element pro splnění podmínek pro čistý tepelný přenos tekutin byla zvolena kombinace: **FC3D4** a **FC3D6**. **FC3D4**(tetrahedron) a **FC3D6**(prism) jsou lineární elementy přímo přiřazené pro CFD simulace. Celkový počet vytvořených elementů pak byl: 182341.

Hustota sítě je vidět na 4.8 s tím, že na ko-simulační hranici byla znovu vytvořena dvojitou tenkou **boundary vrstva** z důvodu minimalizace chyb, které by mohly vzniknout z důvodu interakce s pevnou částí a větším tepelným gradientem.[6]



Obrázek 4.8: Detail sítě pro CFD část modelu

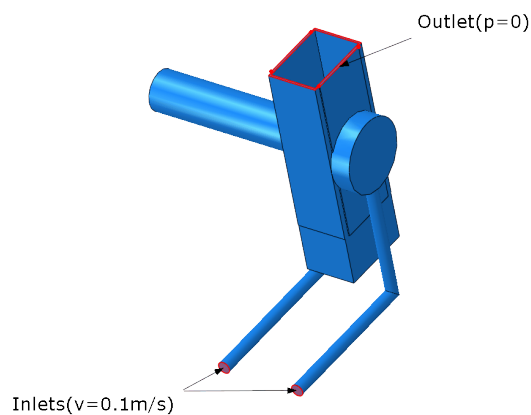
Počáteční teplota modelu vzduchu byla nastavena na  $T = 18^{\circ}\text{C}$  z důvodu potřeby určitého teplotního gradientu pro rychlejší (a spolehlivější) rozběh simulace, kde **Abaqus** má občas problém při výpočtech s počáteční minimální změnou.

#### 4.4.2 OP: Přívod a odvod vzduchu

##### Přívod vzduchu

Pro chlazení, tepelný přenos mezi držákem a kyvetou a minimalizaci nechtěné kondenzace na skleněných površích byly do držáku umístěny otvory pro zajištění ventilace suchým vzduchem a definovány do simulace podle následujících parametrů:

Plochy pro přívod vzduchu jsou označeny na 4.9 s nastaveným fixním přívodem vzduchu o rychlosti  $v_{inlets} = 10\text{mm/s}$  a vstupní teplotou  $T_{inlets} = 18^{\circ}\text{C}$ .



Obrázek 4.9: Pozice pro zavedení vstupních podmínek proudění

### Odvod vzduchu

Oblast pro odvod vzduchu je také označen na 4.9 a je určen nulovým tlakem a výstupní teplotou stejně jako u vstupu  $T_{outlet} = 18^{\circ}\text{C}$ .

#### 4.4.3 Ko-simulační hranice

Pro zajištění splnění ko-simulačních podmínek bylo zapotřebí vytvořit OP o schodném názvu a s totožnou plochou k vybrané ploše v modelu držáku. Tato ko-simulační plocha zaujímá veškeré zbylé plochy z obr. 4.9 tedy plochy, na kterých už není zavedená odlišná OP, či zatížení.

#### 4.4.4 Step

Vzhledem k tomu, že provádíme ko-simulaci, tak název i doba kroku **CFD** musí odpovídat kroku **solid** části.



### Parametry pro konvergenci

Oproti předchozí části byla **CFD** část simulace časově náročnější na výpočet i náchylnější na konvergenci a proto byla potřeba upravit velikost parametru pro **Courant–Friedrich–Lewyho**(CFL) podmínku na 50.

**CFL** podmínka je důležitá především v případě provádění výpočtů pomocí explicitní metody, kde funguje jako nutná podmínka konvergence úlohy (stejně kritérium se používá i kontrolu konvergence hyperbolických parciálních rovnic řešených pomocí metody konečných diferencí). Samotná podmínka je pak definována rovnicí (4.35).

$$CFL = \frac{|u| \cdot t}{x} \leq 1 \quad (4.35)$$

kde:

$|u|$  posun(rychlost v našem případě) zkoumané částice

$t$  velikost časového kroku

$x$  vzdálenost mezi elementy

Tato podmínka nám vlastně říká, že vzdálenost, kterou za zvolený čas krok může zvolená informace(částice) urazit, musí být menší než vzdálenost mezi jednotlivými elementy sítě.

Pro stabilitu řešení v programu **Abaqus** je nastavena tato podmínka na  $CFL \leq 0.45$ , ale pokud pracujeme s implicitním řešením a časový integrační parametr máme nastavený na **Backwards-Eulers**, tak se této hodnoty držet nemusíme (její velikost se pouze použije pro určení časového kroku) a může si zvolit větší hodnotu pro urychlení simulace. V mém případě jsem nastavil maximální velikost podmínky na  $CFL = 50$ .

Dále jsem zvýšil limity iterace pro **momentovou** a **tlakovou** rovnice na 500, hodnoty pro transportní rovnici jsem mohl nechat na 250 na základě předchozích zkoušek.

Jak už jsem zmínil, tak jako časový integrační parametr pro tuto simulaci použiji podle **Backwards-Eulera**. Defaultně máme sice nastaveno částečně-implicitní **trapezoidní** parametr s druhým stupněm přesnosti, ovšem pokud řešíme přechodný tepelný přenos u kterého nás zajímá finální ustálený stav(náš případ) tak je možno použít plně implicitní **Backwards-Eulera**, který je bezpodmínečně stabilní a umožňuje použití vyšších hodnot **CFL** kritéria. [4][6]

## Zpracování výsledků a diskuze

### 5.1 Zpracování výsledků

#### 5.1.1 Výchozí simulace

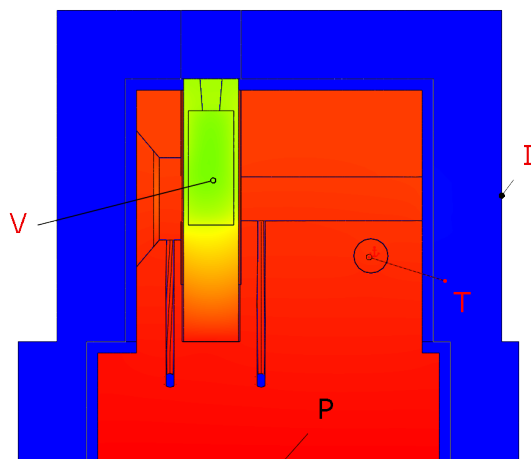
První ko-simulace, která má zároveň sloužit jako výchozí model pro porovnání, proběhla při zanedbání vlivu **radiace** (přesněji její okrajové podmínky) a při nastavené vstupní rychlosti a teplotě chlazení suchým vzduchem:

$$v_{vzduch} = 10\text{mm s}^{-1} \quad T_{vzduch} = 18^{\circ}\text{C}$$

Za hlavní porovnávací kritérium jsem zvolil závislost průběhu teploty během simulace mezi zvolenými regiony reprezentované vybranými referenčními body (viz obr.5.1):

- Kontrolní nastavení teploty podle OP peltierova článku (**P**)
- Teplota uprostřed teplo-vodivé pasty kde by ve skutečném modelu bylo umístěno tepelné čidlo (**T**)
- Referenční teplota na vnějším povrchu izolace (**I**)

- Náhodně zvolený bod uprostřed biologického vzorku(vody) (bod zde nebyl vybrán tak, aby reprezentoval maximální dosaženou hodnotu vzorku, ale spíše pro obecnou reprezentaci závislosti na ostatní RB) (**V**)



Obrázek 5.1: Zvolené pozice referenčních bodů pro porovnání teplot

Pro lepší představu je možné rozdělit průběh simulace na několik částí:

### I. Ohřívání $t \in \langle 0; 170s \rangle$

- náběh** fáze zavedení OP tepelného článku a reakce modelu na změnu
- růst** relativně stabilní ohřívání většiny modelu (některé části modelu např. oblast vzorku ohřívána laserovým paprskem zevnitř, kondukcí tepla od spodku kyvety a společným vlivem radiace s proudem vzduchu stále vykazují i v počátku druhé části fáze složitěji popsateľné rozložení pole teplot )

### II. Ustálení $t \in \langle 170; 300s \rangle$ Dosažení maximální hodnoty OP tepelného článku a postupné ustálení modelu při stálém udržování dané OP

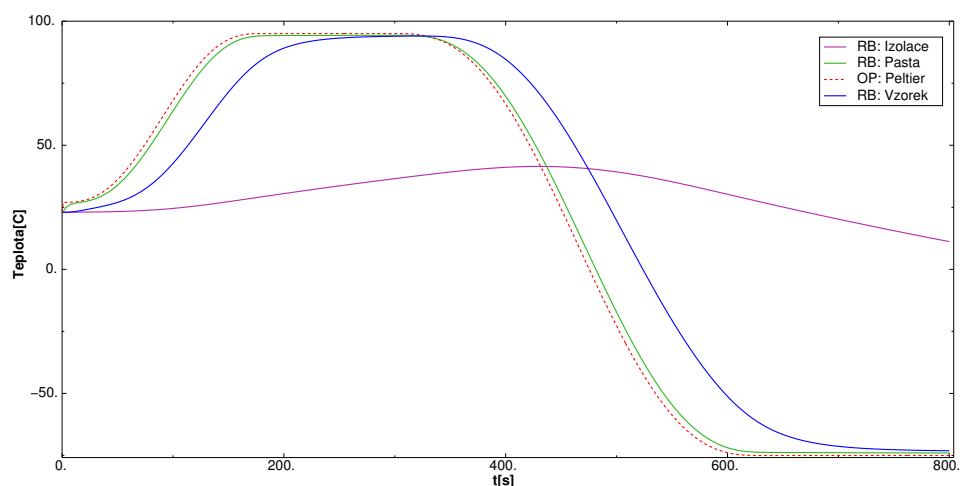
### III. Ochlazování $t \in \langle 300; 570s \rangle$

i) **reakce** nastavení OP začíná klesat a spodní část modelu (včetně RB pasty) se ochlazuje, ale některé části modelu, hlavně kyveta, vzorek a izolace reagují pomaleji, případně i mohou dosáhnout vyšší teploty.

ii) **pokles** stabilní pokles teploty v celém modelu

**IV. Ustálení**  $t \in \langle 570; 800s \rangle$  Dosažení minimální hodnoty OP a postupné ustálení na minimální teplotu

Samotný průběh teplotních závislostí pro vybrané RB je zobrazen na následujícím grafu 5.2:

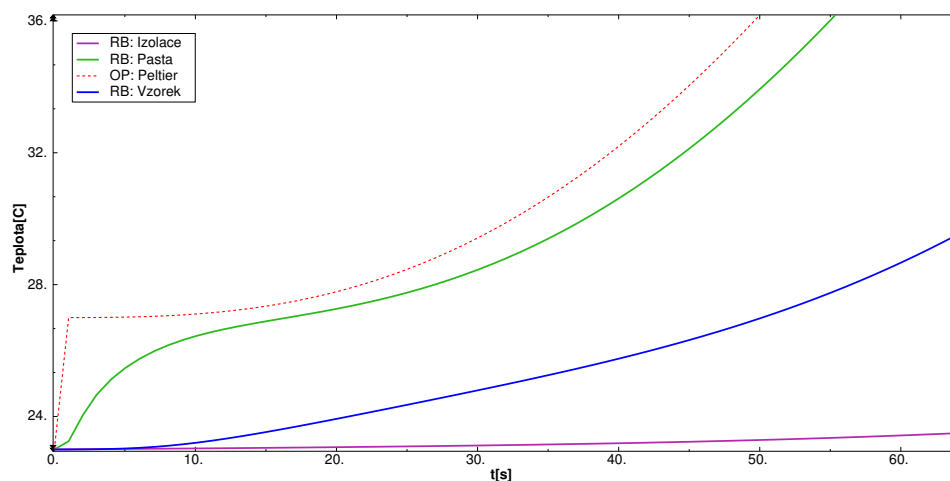


Obrázek 5.2: Průběh měřené teploty referenčních bodů pro výchozí simulaci

Téměř minimální rozdíl mezi průběhem teplot OP článku a RB uvnitř teplovodivé pasty během celé simulace není až tak překvapivý vzhledem k tomu, že součinitel tepelné kondukce hliníku umožňuje velmi rychlou reakci a i když vlastní součinitel vybrané teplo-vodivé pasty je řádově menší, tak zvolené umístění spolu s kontaktní plochou umožní velmi dobrý přenos.

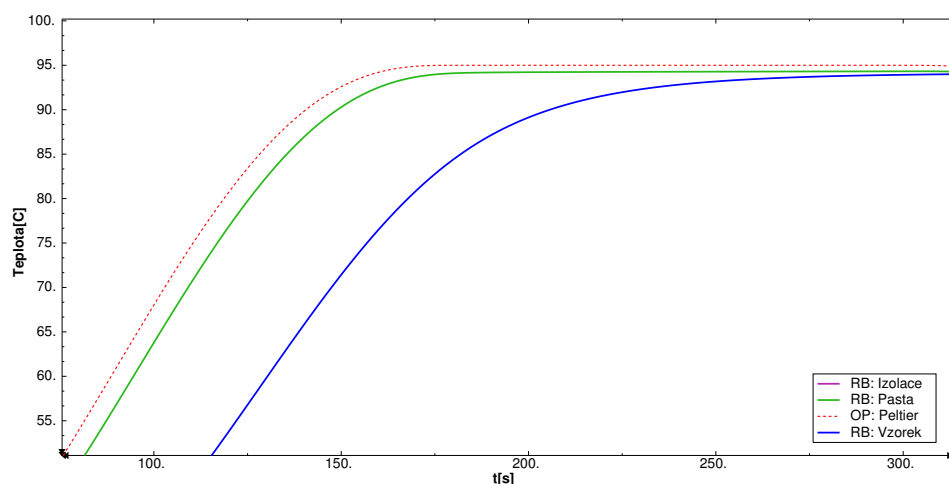
Odezva na růst OP článku je o trochu pomalejší pro RB vzorku ( $t_{odezva} = 40$  s), ale při dobrém nastavení řízení teploty článku nemusí být složité s určitým

zpožděním nastavit přesnou teplotu vzorku. Detail náběhové fáze ohřívání je zobrazen na grafu 5.3



Obrázek 5.3: Detail náběhové fáze výchozí simulace  $t \in \langle 0; 70s \rangle$

Po dosažení maximální teploty OP ( $T_{OP} = 95^\circ\text{C}$ ) v čase  $t_{ust} = 180s$  byla teplota OP udržována po dobu  $t = 120s$ . Z detailu fáze ustálení 5.4 je možné pak odečíst, že RB uvnitř pasty měl průměrné zpoždění zhruba  $t_{z-pasta} = 21s$  s výslednou dosaženou teplotou  $T_{pasta-max} = 94.321^\circ\text{C}$  v čase  $t = 303s$



Obrázek 5.4: Detail průběhu teplot při dosažení maximální teploty článku,  $t=180-300s$

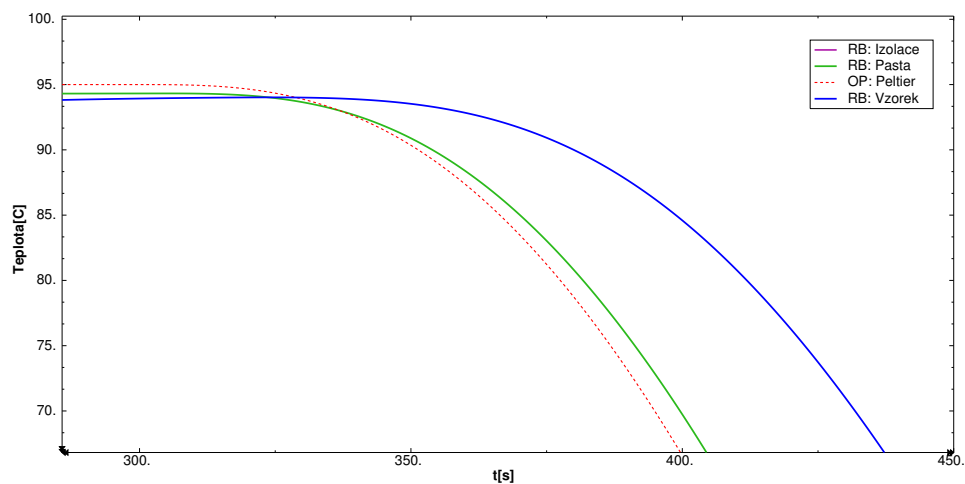
Zpoždění pro vybraný RB uvnitř vzorku bylo o něco větší, s dobou ustálení  $t_{z-voda} = 265s$ , po které byla následná změna teploty minimální. Konečná dosažená teplota pro měřený čas  $t = 300s$  byla pak  $T_{max} = 93.930^{\circ}C$  s rozdílem oproti nastavené teplotě článku  $\Delta T = 1.07^{\circ}C$ . Maximální teplota RB vzorku byla pak dosažena až v počáteční fázi ochlazování, kde už ale dochází k poklesu hodnot ostatních RB. Pro budoucí simulaci by tak možná bylo vhodné prodloužit dobu pro ustálení, pokud bude v zájmu zjistit přesnější maximální teplotu RB vzorku, ale pro mé potřeby byla zvolená doba ustálení dostačující.

V tabulce 5.1 jsou pak zaneseny odměřené teploty vybraných RB pro význačné časy v intervalu  $t \in \langle 180; 330s \rangle$

Tabulka 5.1: Průběh a maximální teploty pro oblast  $t \in \langle 180; 330s \rangle$

t[s]	OP:Peltier[°C]	RB: Pasta[°C]	RB: Vzorek[°C]
180	95	94.105	84.440
265	95	94.293	93.543
300	95	<b>94.321</b>	93.930
303	94.995	<b>94.321</b>	93.947
324	94.4	94.020	<b>94.020</b>

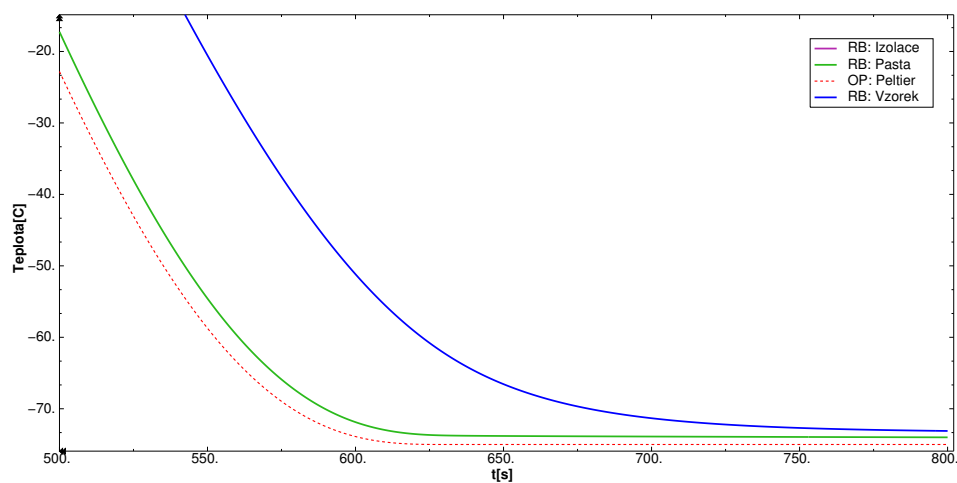
V následujícím grafu 5.5 je pak zobrazen detail pro čas  $t=320s$  kde je zavedena OP chlazení analyzátoru. Odezva průběhu RB pasty je téměř okamžitá na změnu OP a také časové zpoždění RB pasty i vody za teplotou OP je téměř totožné s předchozí částí (pro RB vzorku je reakce zhruba o 1s pomalejší, tedy celkové zpoždění je  $t=41s$ )



Obrázek 5.5: Detail průběhu teplot při poklesu OP,  $t=320s$

Na posledním grafu 5.6 z konce simulace je pak znovu vidět, že i závislost a výsledný rozdíl teplot mezi OP a RB uvnitř pasty je téměř totožný s průběhem kolem časového kroku  $t=180s$ .

Zpoždění mezi průběhem teplot OP a pasty je zhruba  $\Delta T = 5s$  během ohřívání i chlazení.



Obrázek 5.6: Detail průběhu teplot na konci simulace,  $t=800s$



Tabulka 5.2: Průběh a maximální teploty pro oblast  $t \in \langle 630; 800s \rangle$ 

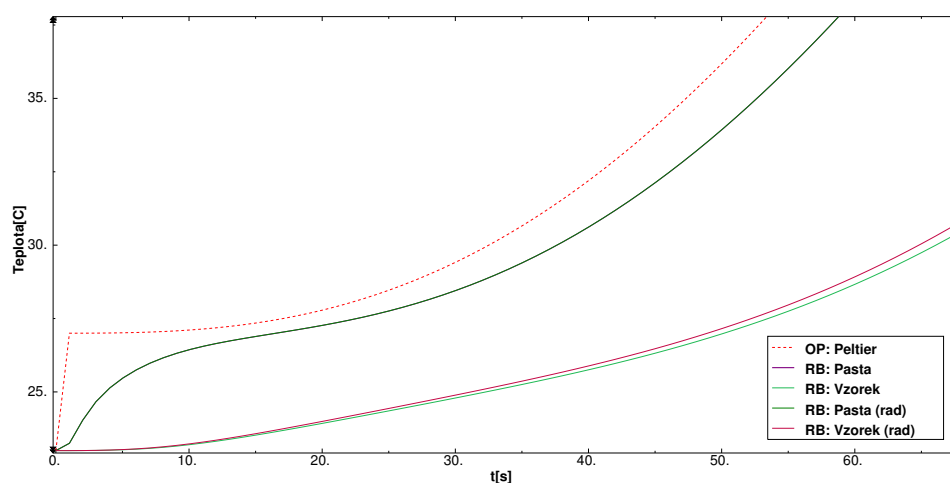
t[s]	OP:Peltier[°C]	RB: Pasta[°C]	RB: Vzorek[°C]
630	-75	-73.735	-62.233
797	-75	-74	-73.107

### 5.1.2 Simulace s radiací

Druhá simulace, která byla provedena pro porovnání, byla kopie předchozí simulace doplněná o vliv radiace mezi držákem, kyvetou a izolací.

Při návrhu předchozí simulace byl vliv radiace zanedbán, jednak důvodu snížení časové náročnosti (byl očekáván velký nárůst potřebného času), tak i z proto, že nebyla předpokládána výrazná změna na výslednou odchylku teploty vlivem radiace.

Nakonec byla časová náročnost obou simulací téměř totožná (rozdíl pár sekund, který je při celkové době simulace  $t=90h$  prakticky zanedbatelný), ale hlavně jak je i vidět v detailu na obr. 5.8 tak výsledný vliv radiace na průběh teploty není zanedbatelný.



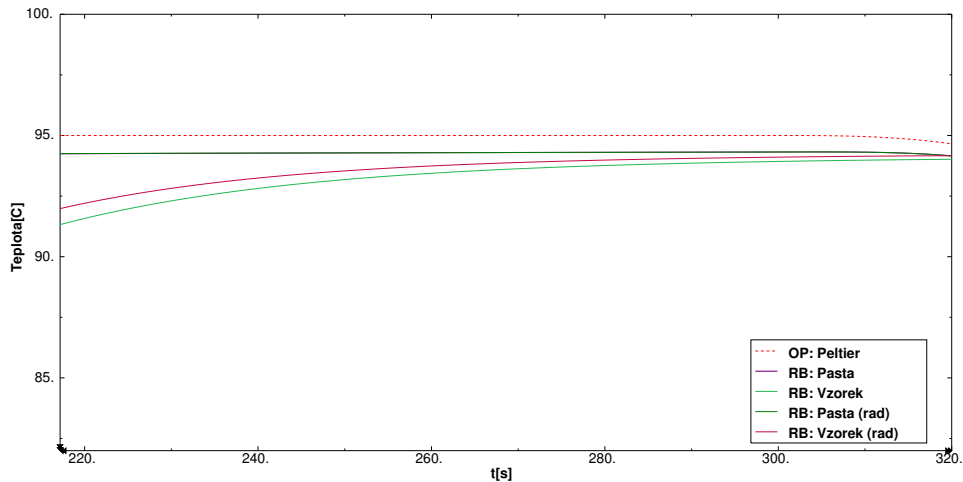
Obrázek 5.7: Vliv radiace na rozdíl teplot v RB vzorku a pasty, detail začátku

Tabulka 5.3: Rozdíl teplot mezi výchozí simulací a simulací s radiací pro vybrané časy

t[s]	RB: Vzorek[°C]	RB: Vzorek (rad)[°C]	$\Delta T$ [°C]
<b>70</b>	31.028	31.387	0.359
<b>300</b>	93.930	94.107	0.177
<b>630</b>	-62.842	-62.233	0.609

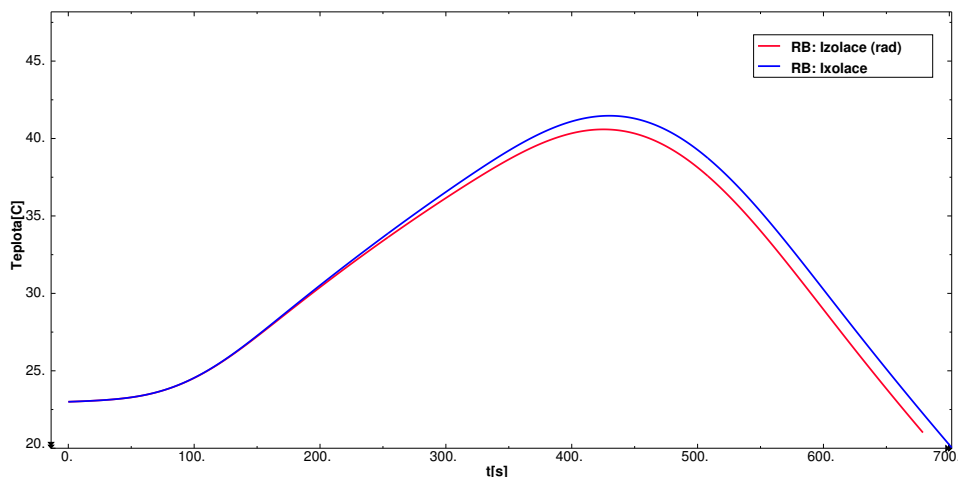
Z grafů je pak možné odečíst, že rozdíl mezi hodnotami v referenčních bodech uvnitř teplo-vodivé pasty je téměř nulový (pro čas  $t = 165s$  je rozdíl  $\Delta T = 0.015^\circ\text{C}$ , tedy pro simulaci zanedbatelná změna). Naopak rozdíl pro vybraný referenční bod uvnitř vzorku dosahuje už při náběhové části simulace rozdílu  $\Delta T = 0.359^\circ\text{C}$ , neboli časový rozdíl pro dosažení stejné teploty je  $t = 5s$ . Více porovnání pro vybrané časy je uvedeno v tabulce 5.3.

Pozitivním výsledkem zavedení této podmínky je pak snížení rozdílu mezi referenčními body vzorek-pasta v ustálené teplotě ( $T = 95^\circ\text{C}$ ) o  $\Delta T_{rad} = 0.177^\circ\text{C}$  na výsledný rozdíl  $\Delta T_{vys} = 0.211^\circ\text{C}$ .

Obrázek 5.8: Vliv radiace na rozdíl teplot v RB vzorku a pasty, detail ustálení  $t \in \langle 220; 320s \rangle$ 

Zásadní rozdíl je vidět i mezi teplotami RB izolace, kde sice v první polovině

simulace (ohřívání) není vidět zásadní změna, ovšem v následující fázi ochlazování dosáhne rozdíl velikosti až  $\Delta T = 1^\circ\text{C}$  viz. obr. 5.9



Obrázek 5.9: Vliv radiace na rozdíl teplot v ref. bodech izolace

### 5.1.3 Simulace s nastavenou vstupní rychlostí proudění $v = 300\text{m s}^{-1}$

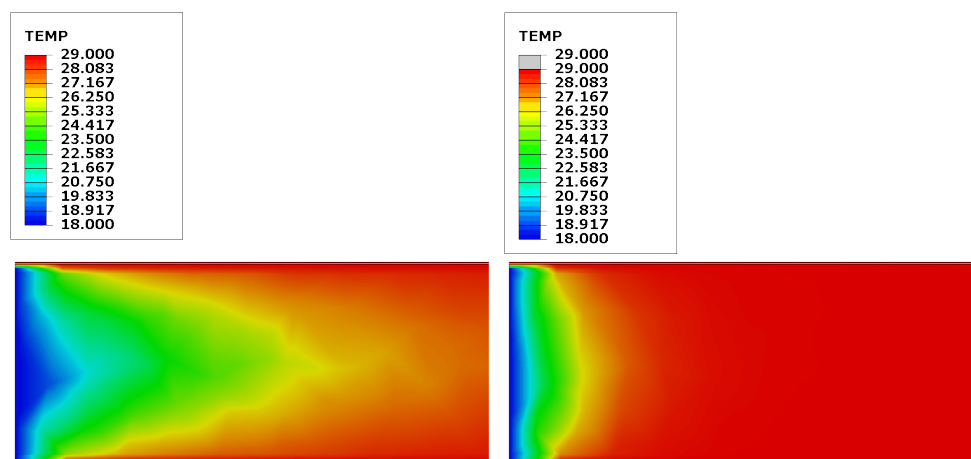
Pro zjištění vlivu rychlosti proudění chladicího média na celkovou tepelnou rovnováhu modelu (přesněji na vybrané RB) jsem se rozhodl provést jednu simulaci při značně předimenzované velikosti vstupní rychlosti proudění  $v_{inlets} = 300\text{m s}^{-1}$ .

Časová náročnost výpočtu byla podle očekávání mnohem větší než u výchozího výpočtu (pro kombinaci výpočetních jader 4+4(Solid/CFD) běžela simulace rychlostí 5s výpočtu na 12h reálného času) a rozhodl jsem se tak provést simulaci pouze pro prvních 29s.

Překvapivě (alespoň podle hodnot z prvních 29s) nemělo zvýšení rychlosti proudění na změnu hodnot v RB téměř žádný vliv (rozdíl pro RB uvnitř teplovodivé pasty v čase  $t = 19\text{s}$  dosáhl  $T_{v300} = 0.011^\circ\text{C}$ ).

Jak je i vidět na obr. 5.10 tak změna rozložení pole teploty uvnitř proudění

se projeví prakticky pouze na vstupu (první 3 mm) a nemá tak znatelný vliv na zbytek simulace.

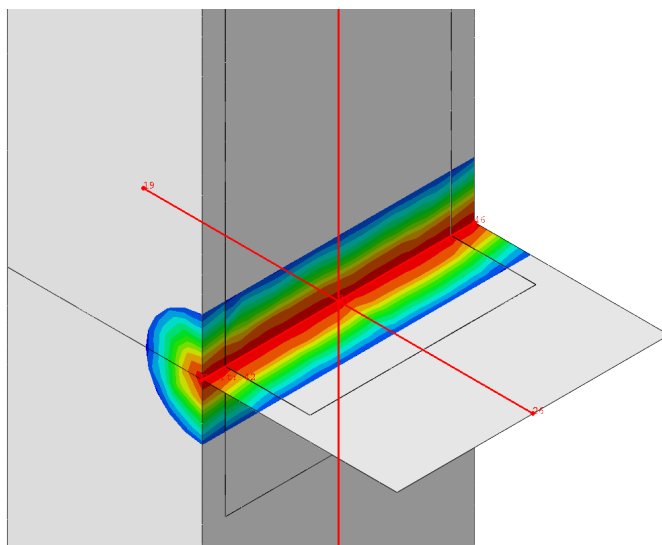


Obrázek 5.10: Vliv změny vstupní podmínky rychlosti na změnu teploty proudění v prvních 3mm vstupních otvorů

### 5.1.4 Vliv laserového paprsku na rozložení teploty vzorku

V předchozích částech byl pro reprezentaci vzorku použit vybraný RB, který byl náhodně vybrán v pozici blízké se středu vzorku. Jeho velikost sice dobře reprezentuje střední dosaženou teplotu uvnitř vzorku a hodí se tak pro obecné porovnání, pro některé situace ovšem je pro nás důležité znát přesněji určené rozložení pole teplot uvnitř vzorku, kdy například dosažení vyšší maximální teploty uvnitř vzorku než je zobrazeno pro vybraný RB mohlo mít za následek nechtěnou degradaci vzorku, či znehodnocení měření.

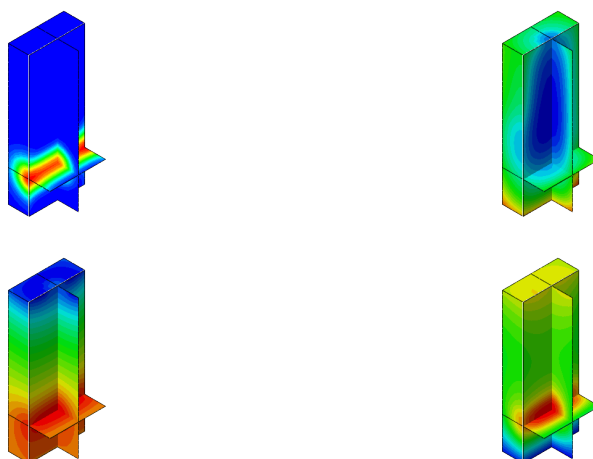
Pro toto zhodnocení a zároveň i zjištění vlivu laserového paprsku na změnu teploty uvnitř vzorku (stěn kyvety) byl zhodnocen průběh teplot ve vybraných časech pro vybrané osy procházející (nebo kolmé) na osu laserového paprsku uvnitř vzorku viz obr. 5.11



Obrázek 5.11: Vybrané osy (cesty) pro zobrazení průběhů teplot uvnitř vzorku

Pro porovnání jsem pak vybral pro simulaci významné časy  $t = (300s, 800s)$  občas doplněné grafy pro  $t = (1s, 135s)$  pro lepší zobrazení čistého působení paprsku/situace v náběhové části.

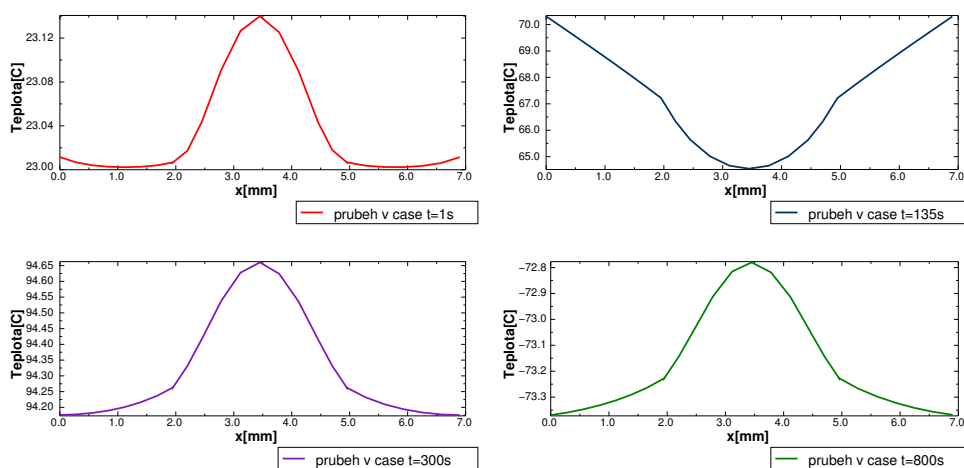
Pohled na rozložení teplot ve vzorku je pak zobrazen na 5.12



Obrázek 5.12: Rozložení pole teplot vzorku pro vybrané  $t = (1s, 135s, 300s, 800s)$

### Horizontální osa kolmá k paprsku

Na obr 5.13 a grafech 5.12 je dobře vidět, že na rozložení pole teplot pro horizontální osu, kolmou na směr paprsku, má absorpce tepla laserového záření nezanedbatelný vliv a podle očekávání splňuje normální (Gaussovo) rozložení podle zavedené OP.

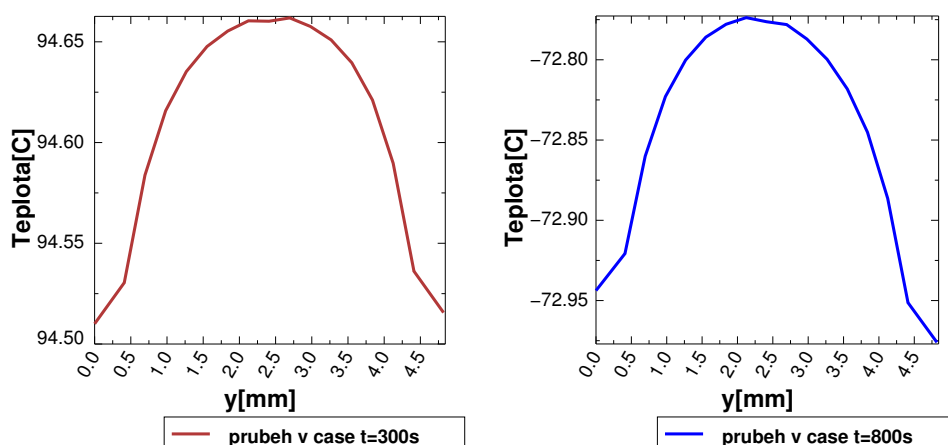


Obrázek 5.13: Rozložení pole teplot po hor. ose kolmé k paprsku,  $t = (1s, 135s, 300s, 800s)$

První graf v čase  $t = 1s$  zobrazuje čistý vliv laserového paprsku na ohřev vzorku, kde už za 1s simulace došlo k zvýšení teploty v centru paprsku o  $\Delta T = 0.14^\circ\text{C}$  a hned ukazuje, že vliv laseru na ohřev vzorku nemůže být zanedbán. Na druhém grafu je pak možné vidět, že vliv ohřevu skrz stěny kyvety způsobený přenosem tepla z proudění (případně radiací) převyšuje vliv ohřevu paprskem. Z toho můžeme usoudit, že v průběhu ohřívání (chlazení) pro nás vliv laserového paprsku na rozložení teplot uvnitř vzorku není zásadní a spíše nabývá důležitosti pro stabilní situace

### Horizontální osa vedená paprskem

Na grafech 5.14, které zobrazují průběh teplot od vnější výstupní plochy kyvety po ose laserového paprsků až k druhé stěně kyvety pro časy  $t = (300\text{s}, 800\text{s})$  lze odečíst, že maximální teplota bude dosažena přibližně ve středu osy paprsku procházejícím kyvetou (přesněji je maximální hodnota dosažena ve vzdálenosti  $\Delta y = 0.15\text{mm}$  od středu osy paprsku, ale rozdíl teplot pro tuto odchylku už je zanedbatelný  $\Delta T = 0.015^\circ\text{C}$ ).



Obrázek 5.14: Rozložení teploty vzorku v ose laserového paprsků pro vybrané  $t = (300\text{s}, 800\text{s})$

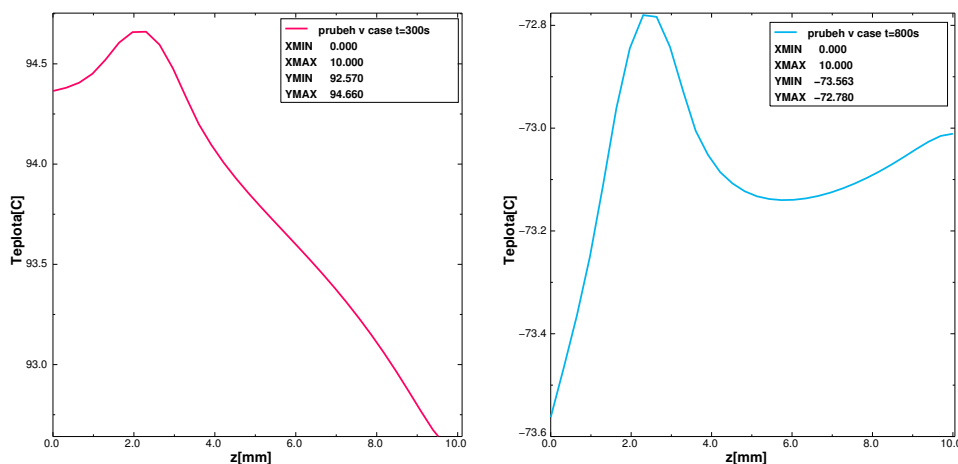
Z rozdílné počáteční a konečné teploty pro vybrané časy z náběhové a chladicí fáze je možné usoudit vliv rozdílného proudění kolem stěny kyvety, který bude ještě podrobněji zobrazen v následující části práce. Celkový rozdíl mezi vnějšími povrchy kyvety je ale znovu prakticky zanedbatelný ( $\Delta T_{800\text{s}} = 0.032^\circ\text{C}$  a  $\Delta T_{300\text{s}} = 0.06^\circ\text{C}$ ) a vliv rozdílného proudění na stěnu kyvety můžeme tak uvažovat jako minimální.

### Vertikální osa kolmá k paprsku

Rozdíl mezi průběhy teplot pro vybrané časy  $t = (300\text{s}, 800\text{s})$  je výrazněji zobrazen na výběru z vertikální osy (cesta pro výpis hodnot je vedena od spodní plochy vzorku k otvoru kyvety).

V ohřívací fázi je znovu jasně zobrazen extrém ve středu laserového paprsku s poklesem teploty směrem k otvoru spolu s drobným skokem těsně u otvoru pravděpodobně vlivem podmínky volné konvekce na rozhraní vzorek-vzduch (samotný skok je ale téměř neznatelný a na celkový výsledek nebude tak mít zásadní vliv).

Důležitější je pak celkový rozdíl mezi spodní a horní částí vzorku (potažmo maximem v ose paprsku a minimem na otvoru kyvety), kde se dosáhne rozdílu až  $\Delta T_{ver} = 2.09^\circ\text{C}$ . Tento rozdíl může mít výrazný vliv na případný experiment, kde rozdílná teplota uvnitř vzorku může mít vliv na stabilitu vzorku, či vyhodnocení výsledků.

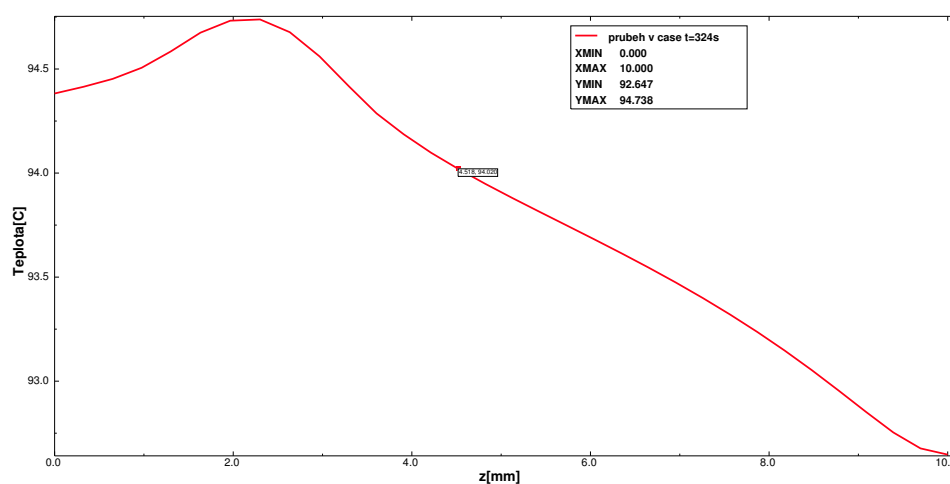


Obrázek 5.15: Rozložení teploty vzorku podél vertikální osy kolmé na laserový paprsek pro vybrané  $t = (300\text{s}, 800\text{s})$

Na 5.16 je zobrazen průběh v čase  $t_{\max} = 323\text{s}$  kdy byla dosažena maximální



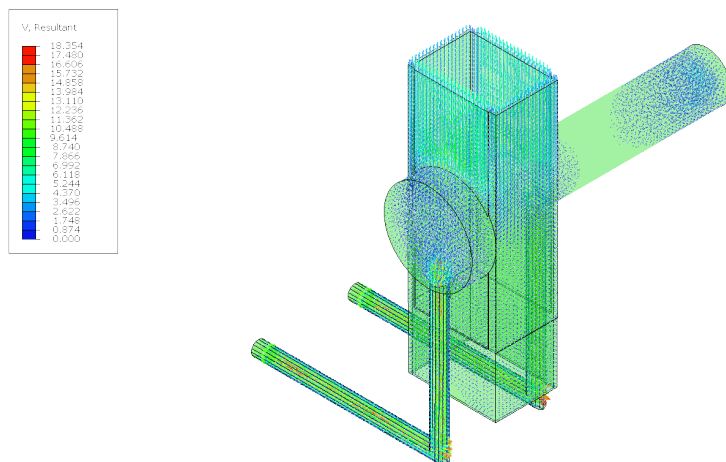
teplota vzorku v ose paprsku a graf je také doplněn o pozici vybraného RB vzorku pro porovnání. Rozdíl teplot mezi RB a bodem maxima je pak  $\Delta T = 0.718^\circ\text{C}$ .



Obrázek 5.16: Rozložení teploty vzorku včetně maximální dosažené a RB na vertikální ose v čase  $t = 323\text{s}$

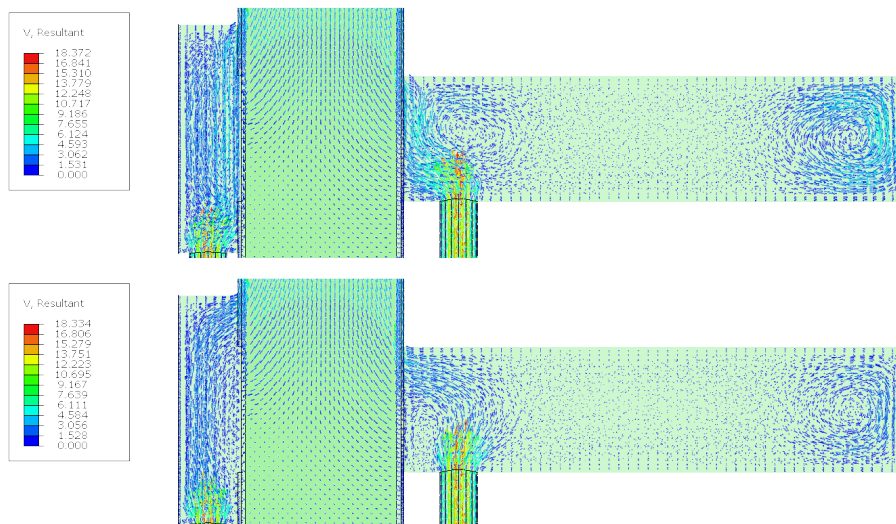
### 5.1.5 Vliv teploty na rozložení proudění

Rychlostní profil proudění, který je zobrazen na 5.17 pro čas  $t = 323\text{s}$  v této simulaci nepřinesl výrazné překvapení, kde k ustálení rychlostního a tepelného profilu proudění dojde téměř okamžitě a jediná výraznější změna se vyskytne při přechodu teplot přes nulu.



Obrázek 5.17: Pohled na rozložení rychlostního pole CFD části pro čas  $t = 323s$

Vliv změny teploty na směr proudění je zobrazen na obr. 5.18 kde pro kladné teploty se proud suchého vzduchu drží blíže k stěně kyvety a naopak po přechodu do záporných hodnot se od stěny kyvety odtrhává. Efekt tohoto jevu na průběh teplot podél stěn může být odpovědí na drobnou nepravidelnost zobrazenou na předešlém grafu 5.14



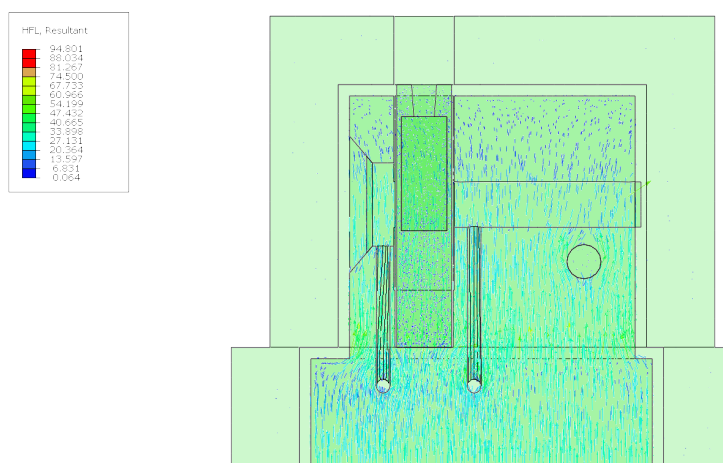
Obrázek 5.18: HFL - vektorové zobrazení tepelného toku pro vybrané  $t = (114s, 568s)$

Vzhledem k minimálním rozměrům chladicích cest dochází (jak bylo dobře

vidět i v simulaci s nastavenou rychlostí  $v = 300\text{mm/s}$ ) k téměř okamžitému přizpůsobení teploty z okolního prostředí.

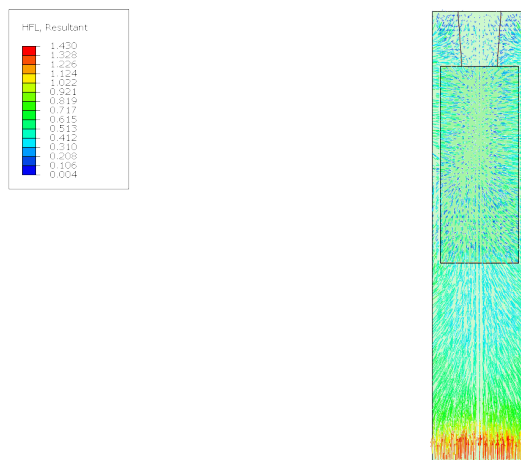
### 5.1.6 Celkový pohled na rozložení tepelného toku

Pro lepší zobrazení vzájemné interakce všech částí celého **solid** modelu, nejen tedy částí důležitých pro vyhodnocení cíle práce bylo do práce zahrnuto několik pohledů na vektorové rozložení tepelných toků, ze kterých je možné získat lepší představu o celkovém chování (průběhu).



Obrázek 5.19: Reakce průběhu proudění na změnu teploty pro vybrané  $t = (114\text{s}, 568\text{s})$

Na 5.19 je pro čas  $t = 131\text{s}$  během fáze ohřívání je potvrzeno, že ohřev probíhá s větší rychlostí v hliníkové části modelu, než probíhá uvnitř kyvety, vzorku a pasty (u té ovšem z důvodu dobré kontaktní plochy dojde jen k minimálnímu zpoždění). V samotné izolaci pak není vidět téměř žádný vektor tepelného toku a nedochází tak k nechtěnému ohřívání izolace, která by tak nesplnila svůj účel.



Obrázek 5.20: tepelný tok daný změnou teploty pro vybrané  $t = (114s, 568s)$

Zajímavý je pak pohled na izolovaný model kyvety se vzorkem v čase  $t = 38s$  na obr. 5.20 kde je dominantním zdrojem TK spodní část kyvety. Dále je vidět poměrně rovnoměrné rozložení TK po obou stranách kyvety s pouze drobnými výchyly (pravděpodobně způsobené umístěním ventilačních výstupu pro proudění) a ztráty volnou konvekcí otvorem kyvety.

Nakonec jsem pro čas  $t = 300s$  nechal zobrazit rozložení TK pouze pro vzorek, kde jsem objevil chybu v předchozí domněnce, že nebyla stanovena dostatečná doba pro ustálení teploty vzorku, ale naopak je vidět, že jediným zdrojem ohřevu vzorku už je pouze laserový paprsek.

### 5.1.7 Výsledky

Pro finální porovnání a zhodnocení byly do tabulky 5.4 zaneseny následující hodnoty, které se dají použít pro lepší představu závislosti vybraných RB spolu s dosaženými extrémy uvnitř vzorku. Tyto hodnoty spolu v kombinaci s použitím grafů a exportovaných obrázků rozložení teplot ve vzorku a modelu by měly být schopné do určité úrovně popsat většinu stavů pro simulaci význačných situací a pomoc tak v návrhu případně budoucí simulace (analyzátoru).

Pro poslední řádek chybějí hodnoty pro simulaci s vlivem radiace, která byla ukončena předčasně a požadovaná hodnota tak chybí.

Tabulka 5.4: Výsledné teploty a rozdíly pro vzájemné porovnání a zhodnocení

t[s]	OP[°C]	RB:Pa[°C]	RB:Vz[°C]	RB:Pa-r[°C]	RB:Vz-r[°C]	$\Delta T_{max}$ [°C]	$\Delta T_{min}$ [°C]
<b>180</b>	95	94.106	84.440	<b>94.117</b>	85.638	90.018	85.429
<b>265</b>	95	94.293	93.543	<b>94.295</b>	93.821	94.548	92.429
<b>300</b>	95	<b>94.319</b>	93.930	94.318	94.107	94.801	92.648
<b>324</b>	94.4	94.020	94.020	94	<b>94.162</b>	94.849	92.662
<b>630</b>	-75	-73.735	-62.233	-73.754	-62.842	-62.728	-67.794
<b>797</b>	-75	-73.997	-73.093	x	x	-72.765	-73.574

kde:

$OP$  = OP:Peltierův článek

$RB : Pa$  = RB Pasta - výchozí simulace

$RB : Vz$  = RB Vzorku - výchozí simulace

$RB : Pa - r$  = RB Pasta - simulace s vlivem radiace

$RB : Vz - r$  = RB Vzorku - simulace s vlivem radiace

$\Delta T_{max}$  = Maximální teplota vzorku pro simulaci s vlivem radiace

$\Delta T_{min}$  = Minimální teplota vzorku pro simulaci s vlivem radiace

= Hodnoty extrému pro poslední krok byly brány z výchozí simulace

## 5.2 Diskuze

I když bylo snahou navrhnout simulaci takovým způsobem, aby se co nejblíže přiblížila reálnému systému a samotný model optimalizovat pomocí vhodného návrhu modelu spolu s výběrem použitých materiálů (parametrů), tak stále bylo nutné některé parametry modifikovat, či úplně vynechat z důvodů vysoké technické náročnosti implementace, nebo časových nároků.

Některé alternativní možnosti optimalizace se také objevily až v samotném průběhu zpracování výsledků a nezbyl už tak čas pro jejich úspěšné zavedení do úlohy.

V následující části se pak pokusím některé své rozhodnutí odůvodnit, případně poskytnout návrhy na další možný postup.

### Složitější stavba modelu

Pro tuto simulaci byl navržen model držáku, který byl vytvořen pouze z jedné části. Pro reálné použití by ovšem tato varianta byla poměrně nákladná kvůli

složitosti výroby. Pravděpodobně by tedy výsledný produkt byl vyroben z několika částí, u kterých by jako v předešlé části bylo nutné zavést kontaktní ztráty a počítat i potřebnou úpravou návrhu simulace kvůli použitým spojovacím členům (šrouby apod.), které by byly vyrobeny z odlišných materiálů a pro ně použité otvory by také pozměnily ztráty uvnitř držáku.

Upevnění krycích sklíček a peltierova článku by bylo nutné také vhodné zohlednit.

### **Přenos tepla na kontaktu držák-kyveta**

Během simulace jsem nastavil pevnou vazbu mezi kyvetou a držákem, kde program počítá s nulovou mezerou mezi objekty a nedochází zde k žádné tepelné ztrátě. V reálném modelu se ovšem musí počítat s drsností povrchů (především na hliníkové části) a také bude záviset na míře (tlaku) přitlačení kyvety spolu s přesností umístění do otvoru.

Pro zpřesnění simulace by tak bylo vhodné se zaměřit na zavedení určité rezistence (gap funkce) pro přenos tepla mezi spodní částí kyvety a držákem.[11]

### **Peltierův článek**

Pro dosažení teplotních rozsahů  $T_{range} \in \langle -70^{\circ}\text{C}; 95^{\circ}\text{C} \rangle$  jsem sice vybral tepelný článek splňující požadované parametry, ale tento článek by pravděpodobně byl na okraji svých možností (výkonnější už ani vybrat nešlo) a také by byl poměrně drahý a předimenzovaný (pro zachování připojovacího rozměru  $30\text{ mm} \times 30\text{ mm}$  by bylo nutno použít několika fázový článek, který se celkovou velikostí blíží rozměrům držáku).

Pro reálný návrh by tak bylo vhodnější použít článek pouze pro fázi ohřívání

(to dokáže většina tepelných článků spolehlivě dosáhnout) a pro fázi ochlazení použít například trubičkový chladicí systém pomoc vodíku, nebo oxidu uhličitého.[8]

### **Teplo-vodivá pasta**

Jak u tepelného článku, tak i u použité teplo-vodivé pasty by mohly v krajních záporných teplotách se projevit problémy. Většina teplo-vodivých past, které jsem během výběru pro můj model porovnával, neměla problém se správnou funkcí ve vysokých teplotách, ale pro oblast záporných hodnot teploty už existovalo pouze pár možných exemplářů, u kterých ale nebyly uvedeny přesné hodnoty pro minimální možnou teplotu stálého používání.

Teplo-vodivá pasta, kterou jsem vybral pro svoji simulaci, měla ze všech vybraných past nejnižší ověřenou teplotu  $T_{\min} = -50^{\circ}\text{C}$ , ale podle výrobce by měla být krátkodobé funkce i v nižších teplotách, které ovšem nebyly uvedeny.

Pokud by tedy byla potřeba vybrat fixační pastu, která zaručeně bude plnit funkci pro velmi nízké i vysoké teploty, tak je možné použít speciální fixační pasty, u kterých by byl ale součinitel tepelné vodivosti zhruba o dva řády nižší v porovnání s běžnou řadou teplo-vodivých past.[12]

### **CFD modelování vzorku**

Další možnost optimalizace úlohy by byla možná při rozšíření ko-simulační úlohy (přesněji CFD domén) i na oblast vzorku. Z důvodu obtížného zavedení dvou rozdílných oblastí pro simulaci proudění (a i dvou ko-simulačních) jsem pro výchozí ko-simulace uvažoval pouze o proudění (modelu suchého vzduchu) jako o CFD modelu a vzorek jsem ponechal v pevné (**rigid**) konfiguraci.



Pro kontrolu jsem provedl testovací CFD simulaci, kde jsem simuloval pouze model vzorku doplněný o zjednodušené OP vycházející z první části simulace a zatížený objemovým tepelným tokem z laserového paprsku o Gaussovo rozložení.

Ze zobrazení výsledků pak byl vidět pouze určitý posun ohřáté části vzorku směrem vzhůru, což z důvodu nastavení CFD modelu pouze v laminárním režimu a s OP pouze na spodní části a laserem dává smysl. Případná simulace CFD s dobře zvoleným turbulentním nastavením by mohla přinést lepší výsledky, ale značně náročná pro sestavení (odhad parametrů pro turbulenci je poměrně složitá záležitost vyžadující více zkušeností a následnou validaci).

Pro tuto simulaci bylo tedy ponechán region vzorku jako **solid**

### 5.2.1 Další optimalizace

Jako další možnost optimalizace se samozřejmě naskytá minimalizace rozměrů držáku (změna designu), materiálu držáku, kde by bylo tak možné snížit tepelné ztráty, případně minimalizovat potřebnou dobu pro ohřev vzorku.

Umístění krytky (víčka) pro kyvety by ztížilo manipulaci se vzorkem, ale také může přinést určitou minimalizaci tepelných ztrát zejména pro oblast otvoru kde dochází k interakci vzduch-vzorek.

## Závěr diplomové práce

Spektrofotometrie je v zásadě jednoduchá metoda kvantitativní analýzy, která najde své uplatnění pro spoustu oborů, kde stanovení přesných parametrů vybraného vzorku hraje důležitou roli.

V případě práce s anorganickými vzorky je sice možné zanedbat vliv teploty a provádět tak měření v libovolném prostředí s prakticky neomezenou dobou analýzy, ale pokud se ovšem přesuneme do oblasti biochemie (případně analýzy pro lékařské využití), tak parametry okolního prostředí, hlavně teploty už hrají významnou roli. Obzvláště v případech, kdy se pracuje s vysoce nestabilní látkou, u které dochází k rychlé degradaci vzorků při vyšších teplotách je použití analyzátoru, který je schopen pracovat za potřebných teplot a zároveň vlastní rozložení vzniklého pole teplot ve vzorku kvalitně popsat velmi důležité.

Zadáním této práce bylo tedy navrhnout analyzátor biologických vzorků, který by byl schopen ve zvoleném teplotním intervalu bezproblémově pracovat a zároveň i vypracovat podpůrnou simulaci, která by byla schopna pro analýzu význačné rozložení vztahů teplot jednotlivých oblastí dobře popsat.

Na základě provedené rešerše jsem vytvořil tedy návrh analyzátoru včetně několika rozdílných (alternativních) simulací, které jsem pak mezi sebou vzájemně porovnal a zhodnotil.

Z první simulace jsem nejdříve získal informace o obecném chování celého analyzátoru (oblasti vyšších ztrát, oblasti vyššího odporu na změnu teplot apod.) a vzájemné závislosti zvolených RB, včetně maximálních dosažených hodnot a zpoždění za změnou OP peltierova článku.

Tyto hodnoty jsem pak porovnal s druhou provedenou simulací, do které jsem navíc přidal vliv radiace. I když jsem to původně neočekával, tak celkový vliv radiace nebyl zanedbatelný (rozdíl dosahoval pro některé průběhy až  $\Delta T = 0.6^\circ\text{C}$ ) a překvapivě byl i větší rozdíl během ochlazovací části měření, než v ohřívací části. Z důvodu větších rozdílů bych tedy pro budoucí simulace vliv radiace doporučil zahrnout.

Naopak v případě třetí simulace, když jsem značně předimenzoval rychlost proudění na  $v = 300 \text{ mm/s}$  oproti původní rychlosti  $v = 10 \text{ mm/s}$  nedošlo k výraznější změně na celkový model a hlavně byla i celá simulace značně náročná na celkový výpočtový čas.

Nakonec jsem provedl detailní zhodnocení rozložení teplot uvnitř vzorku pro tři navzájem kolmé roviny procházejících středem laserového paprsku, kde jsem zjišťoval samotný vliv ohřevu laserovým paprskem a zda zvolený RB vzorku má schopnost dobře vypovídat o vzorku celém.

Pro paprsek bylo zjištěno, že jeho vliv, obzvlášť pokud by samostatně působil na jinak tepelně nezatížený vzorek by také nebylo vhodné zanedbat (už po uplynutí 1s simulace došlo ke změně teploty v ose paprsku o  $\Delta T = 0.4^\circ\text{C}$ ). Samotný vliv ohřevu paprskem během růstu (poklesu) OP je pak z důvodu většího rozdílu poměrů změn ostatních teplot zanedbatelný, ale v okamžiku ustálení OP se znovu projeví a bylo by tak vhodné pro případ dlouhodobého měření pro zvolenou teplotu po čase nastavenou hodnotu OP snižovat pro udržení potřebné teploty

vzorku.

Ze zhodnocení grafů teplot pro osy vybraných rovin a z rovin samotných bylo pak vidět, že rozložení teplot ve vzorku je poměrně zásadní, kde rozdíl mezi maximální a minimální hodnotou pro daný čas může být až  $\Delta T = 2.09^\circ\text{C}$  a případě vysoké citlivosti vyhodnocení koncentrace vzorku na teplotu by bylo nutné počítat s tím, že získáme rozdílné hodnoty pro různé oblasti vzorku.

Na základě celkového zhodnocení prezentovaných výsledků bych tedy pro případ dalších simulací, případně návrhu analyzátoru doporučil již zmíněné nezanedbání vlivu radiace, opatrnost při vyhodnocení výsledků ze vzorku, kde záleží na zkoumané oblasti a dále bych se pokusil o další optimalizaci rozšířením o ko-simulaci s turbulentní CFD oblastí pro vzorek, eliminovat ztráty pro vrchní plochu kyvety s otvorem (zakrytím, či zátkou) a optimalizoval tvar analyzátoru.

## Bibliografie

- [1] SCHOTT AG. *Optical Glass Data Sheets*. 7. červ. 2018. URL: [https://www.schott.com/d/advanced\\_optics/ac85c64c-60a0-4113-a9df-23ee1be20428/1.3/schott-optical-glass-collection-datasheets-english-17012017.pdf](https://www.schott.com/d/advanced_optics/ac85c64c-60a0-4113-a9df-23ee1be20428/1.3/schott-optical-glass-collection-datasheets-english-17012017.pdf).
- [2] Alcoa. *Aluminum 6061-T6; 6061-T651*. 7. červ. 2018. URL: <http://asm.matweb.com/search/SpecificMaterial.asp?bassnum=ma6061t6> (cit. 07.06.2018).
- [3] Theodore L Bergman et al. *Fundamentals of heat and mass transfer*. John Wiley & Sons, 2011.
- [4] H Martin Bücker, Bernhard Pollul a Arno Rasch. “On CFL evolution strategies for implicit upwind methods in linearized Euler equations”. In: *International journal for numerical methods in fluids* 59.1 (2009), s. 1–18.
- [5] J. Crank. *The Mathematics of Diffusion*. Sv. 2. Clarendon press Oxford, 1975.
- [6] 2014. Dassault Systemes Simulia Corporation. *Abaqus Analysis Users Guide, Ver. 6.14 Documentation*. 2014.
- [7] *Doppler and thermal broadening*. Červ. 2018. URL: <http://astronomy.nyu.edu.cn/~lixd/GA/AT4/AT404/HTML/AT40404.htm>.

- [8] Mouser Electronics. *Thermoelectric Modules MS5,257,10,15,11,W8 Datasheet*. 6. červ. 2018. URL: <https://eu.mouser.com/ProductDetail/Laird/MS5257101511W8?qs=y6ZabgHbY%252byZ4StA8Afvjw==>.
- [9] Michael G Gore. *Spectrophotometry and spectrofluorimetry: a practical approach*. University of Hawaii Press, 2000.
- [10] Hans R Griem. *Principles of plasma spectroscopy*. Sv. 2. Cambridge University Press, 2005.
- [11] DPH Hasselman a Lloyd F Johnson. “Effective thermal conductivity of composites with interfacial thermal barrier resistance”. In: *Journal of Composite Materials* 21.6 (1987), s. 508–515.
- [12] Arctic Silver Incorporated. *Thermal Compounds and Thermal Interface Materials from Arctic Silver Incorporated*. 7. červ. 2018. URL: <https://datasheets.globalspec.com/ps/4159/Xoxide/22BBC3E6-C199-41D5-A518-2F91276B54A2>.
- [13] Leoš NAVRÁTIL a J Rosina. *Medicinská biofyzika. 1. vyd. Praha: Grada, 2005, 524 s. Tech. zpr. ISBN 80-247-1152-4*.
- [14] Del Mar Photonics. *DPSS 532 nm 1W laser DMPV-532-1 (532nm Diode Pumped Solid State Green Laser 1000mW)*. 7. červ. 2018. URL: [http://www.dmpotonics.com/DPSS\\_DMPV532/DPSS%20DMPV-532-1.htm](http://www.dmpotonics.com/DPSS_DMPV532/DPSS%20DMPV-532-1.htm).
- [15] Timothy Soderberg. “Organic Chemistry with a Biological Emphasis Volume I”. In: (2016). URL: [https://chem.libretexts.org/Textbook\\_Maps/Organic\\_Chemistry/Book%3A\\_Organic\\_Chemistry\\_with\\_a\\_Biological\\_Emphasis\\_\(Soderberg\)/Chapter\\_04%3A\\_Structure\\_Determination\\_I/4.4%3A\\_Ultraviolet\\_and\\_visible\\_spectroscopy](https://chem.libretexts.org/Textbook_Maps/Organic_Chemistry/Book%3A_Organic_Chemistry_with_a_Biological_Emphasis_(Soderberg)/Chapter_04%3A_Structure_Determination_I/4.4%3A_Ultraviolet_and_visible_spectroscopy).

- [16] F. M. Sogandares a E. S. Fry. *Absorption spectrum (340640nm) of pure water. I. Photothermal Measurements*. Appl. Opt., 36. 1997.
- [17] Dawid Taler. "Determination of the Local and the Mean Heat Transfer Coefficient on the Inner Surface of a Single Tube and Finding Experimental Correlations for the Nusselt Number Calculation". In: *Numerical Modelling and Experimental Testing of Heat Exchangers*. Springer, 1. led. 2019. ISBN: 978-3-319-91127-4. DOI: 10.1007/978-3-319-91128-1\_13. URL: [http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-91128-1\\_13](http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-91128-1_13).
- [18] Engineering ToolBox. *Dry air properties at temperatures ranging 175 - 1900 K - specific heat, ratio of specific heats, dynamic viscosity, thermal conductivity, Prandtl number, density and kinematic viscosity*. 5. červ. 2018. URL: [https://www.engineeringtoolbox.com/dry-air-properties-d\\_973.html](https://www.engineeringtoolbox.com/dry-air-properties-d_973.html).
- [19] Engineering ToolBox. *Water - Density, Specific Weight and Thermal Expansion Coefficient*. 5. červ. 2018. URL: [https://www.engineeringtoolbox.com/water-density-specific-weight-d\\_595.html](https://www.engineeringtoolbox.com/water-density-specific-weight-d_595.html).
- [20] Jinglin Zheng, Yung-Kan Chen a Qin Zhou. "Heat transfer across a nanoscale pressurized air gap and its application in magnetic recording". In: *Scientific reports* 8.1 (2018), s. 3343.